

Міністерство освіти і науки України
Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника
Фізико-технічний факультет
Кафедра матеріалознавства і новітніх технологій

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор _____

“ _____ ” _____ 2022 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Структурний аналіз

Освітня програма	Прикладна фізика та наноматеріали
Спеціальність	105 Прикладна фізика та наноматеріали
Галузь знань	10 Природничі науки

Івано-Франківськ
2022

Робоча програма спецкурсу «Структурний аналіз»
для підготовки здобувачів третього рівня вищої освіти – доктора філософії
спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали. „___” _____, 2022 р. –
___ с.

Розробники: (вказати авторів, їхні посади, наукові ступені та вчені звання)
Яремій Іван Петрович, професор кафедри матеріалознавства і новітніх
технологій, доктор фізико-математичних наук, професор.

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри матеріалознавства і новітніх
технологій

Протокол № 1 від “29” серпня 2022 р.

Завідувач кафедри матеріалознавства і новітніх технологій

“29” серпня 2022 р. _____ Богдан ОСТАФІЙЧУК

Схвалено методичною комісією фізико-технічного факультету.

Протокол від “30” серпня 2022 р. № 1

“30” серпня 2022 р.

Голова _____
(підпис)

Михайло ЯЦУРА
(прізвище та ініціали)

© Прикарпатський національний
університет імені Василя Стефаника,
2022 рік

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів – 3	Галузь знань 10 Природничі науки	За вибором	
Модулів – 1	Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали	Рік підготовки:	
Змістових модулів – 2		2021-й	-й
Індивідуальне науково-дослідне завдання _____ _____ (назва)		Семестр	
Загальна кількість годин –90		3-й	-й
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2 самостійної роботи студента – 4	третій освітньо-науковий рівень – доктор філософії	Лекції	
		20 год.	год.
		Практичні, семінарські	
		10 год.	год.
		Лабораторні	
		__ год.	__ год.
		Самостійна робота	
60 год.	год.		
Індивідуальні завдання:			
__ год.			
Вид контролю:			
залик			

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи становить: $40/80=0,5$

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: ознайомлення аспірантів із кінематичною та динамічною теоріями розсіяння рентгенівських променів та основними методами аналізу кристалічної структури полі- та монокристалів.

Завдання: навчити студентів аналізувати кристалічну структуру матеріалів на основі методів, які базуються на кінематичній та динамічній теорії дифракції рентгенівського випромінювання.

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен:

знати: кінематичну та динамічну теорії дифракції рентгенівських променів на кристалах; методи аналізу кристалічної структури матеріалів.

вміти: встановити кристалічну структуру матеріалів; визначити фазовий склад, параметр елементарної ґратки, величину мікродеформації, розміри областей когерентного розсіяння і т.д.

3. Програма навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1. Теорія розсіяння рентгенівського випромінювання

Тема 1. Елементи структурної кристалографії

Елементи структурної кристалографії. Зображення кристалів. Символи вузлів, напрямів та площин.

Представлення елементів кристалічної структури. Проекції кристалографічних комплексів – сферична та стереографічна. Математичний опис кристалічної будови. Поняття оберненої ґратки та її властивості.

Тема 2. Основні рівняння дифракції рентгенівського випромінювання на кристалах

Розсіяння рентгенівського випромінювання дискретно розподіленими центрами. Розсіяння вільним електроном. Поляризаційний множник. Ефективний перетин. Когерентне розсіяння атомом. Атомна функція розсіяння.

Розсіяння рентгенівського випромінювання кристалом малого розміру. Структурна амплітуда. Векторна умова Лауе. Побудова Евальда. Інтерференційна функція Лауе. Зв'язок розміру і форми вузла оберненої ґратки із розмірами і формою кристала. Структурна амплітуда непримітивної елементарної ґратки.

Тема 3. Інтенсивність інтерференційних максимумів

Інтегральна інтенсивність розсіяного випромінювання монокристалом. Інтегральна інтенсивність відбивання від полікристала. Вплив поглинання на інтегральну інтенсивність. Дифузне розсіяння рентгенівського випромінювання. Вплив теплових коливань атомів на величину інтегральної інтенсивності.

Змістовий модуль 2. X-променеви структурний аналіз

Тема 4. Рентгенівські установки.

Рентгенівські спектри та методи їх реєстрації. Гальмівне та характеристичне рентгенівське випромінювання. Рентгенівські трубки. Методи реєстрації рентгенівського випромінювання. Лічильники рентгенівського випромінювання та їх характеристики.

Будова рентгенівських установок. Основні вузли рентгенівської установки. Дифрактометр ДРОН-3.0.

Тема 5. Методи рентгеноструктурного аналізу.

Методи аналізу монокристалів. Дослідження монокристалів методом Лауе. Дослідження монокристалів методом обертання.

Аналіз полікристалів. Метод Дебая-Шерера. Рентгенівська дифрактометрія. Індиціювання рентгенограм. Прецизійне визначення параметрів кристалічної ґратки.

Тема 6. Фазовий аналіз.

Якісний фазовий аналіз. Кількісний фазовий аналіз. Методи кількісного рентгенофазового аналізу.

Тема 7. Аналіз дефектів по уширенню дифракційної лінії.

Методи виділення вкладу дисперсності та мікрODEформації у фізичне уширення дифракційної лінії.

Змістовий модуль 3. Динамічна теорія розсіяння X- променів

Тема 8. Динамічна теорія Дарвіна.

Тема 9. Динамічна теорія Евальда-Лауе.

Тема 10. Наближення Такагі-Топена.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	денна форма					
	усього	у тому числі				
лек.		пр. (сем.)	лаб.	інд.	с.р.	
1	2	3	4	5	6	7
Змістовий модуль 1. Структура і властивості матеріалів, та методи їх дослідження						
Тема 1. Елементи структурної кристалографії		2	0	–	–	6
Тема 2. Основні рівняння дифракції рентгенівського випромінювання на кристалах		2	1			6
Тема 3. Інтенсивність інтерференційних максимумів		2	1			6

Змістовий модуль 2. X-променеви́й структурний аналіз						
Тема 4. Рентгенівські установки.		2	1	–	–	6
Тема 5. Методи рентгеноструктурного аналізу.		2	1	–	–	6
Тема 6. Фазовий аналіз.		2	1	–	–	6
Тема 7. Аналіз дефектів по уширенню дифракційної лінії.		2	1			6
Змістовий модуль 3. Динамічна теорія розсіяння X-променів						
Тема 8. Динамічна теорія Дарвіна.		2	1			6
Тема 9. Динамічна теорія Евальда-Лауе.		2	1			6
Тема 10. Наближення Такагі-Топена.		2	2			6
Усього годин	90	20	10	–	–	60

5. Теми семінарських занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
Змістовий модуль 1. Структура і властивості матеріалів, та методи їх дослідження		
1	Структурний множник. Закони погасання. Інтенсивності дифракційних відбивань. Множники інтенсивності.	2
Змістовий модуль 2. X-променеви́й структурний аналіз		
2	Якісний X-променеви́й структурний аналіз	2
3	Кількісний X-променеви́й структурний аналіз	2
Змістовий модуль 3. Динамічна теорія розсіяння X-променів		
4	Дифракція X-променів на шаруватих структурах	2
5	Визначення профілів деформації в приповерхневих шарах іонно-імплантованих матеріалів	2
	Усього годин	10

6. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Основні типи рентгенівських приладів для структурного аналізу.	6
2	Залежність точності визначення параметрів некубічних структур від індексів відбивання.	6
3	Дослідження монокристалів. Огляд методів.	6
4	Способи монохроматизації рентгенівського випромінювання.	6

5	Високотемпературна дифрактометрія. Апаратура і методи.	6
6	Дослідження фазових перетворень.	6
7	Кількісний фазовий аналіз	6
8	Дифузна складова розсіяного рентгенівського випромінювання	6
9	Моделювання дифракції Х-променів у монокристалах	6
10	Моделювання дифракції Х-променів у гетероструктурах	6
	Усього годин	60

7. Методи контролю

- Перевірка засвоєння теоретичного матеріалу, в т. ч методом тестування.
- Перевірка якості виконання практичних робіт.

8. Розподіл балів, які отримують аспіранти

Поточне тестування, семінарські заняття та самостійна робота						
Змістовий модуль №1			Змістовий модуль №2			
T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7
10	10	10	10	10	10	10

Поточне тестування, семінарські заняття та самостійна робота		
Змістовий модуль №3		
T8	T9	T10
10	10	10

T1, T2 ... – теми змістових модулів.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену, курсового проекту (роботи), практики	для заліку
90 – 100	A	відмінно	зараховано
80 – 89	B	добре	
70 – 79	C		
60 – 69	D	задовільно	
50 – 59	E		
26 – 49	FX	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
0-25	F	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

9. Методичне забезпечення

- 1) Лекції, завдання для практичних робіт.
- 2) Програмне забезпечення: навчально-контролюючі програми з кожної теми курсу.

10. Рекомендована література

Базова

1. Сидоренко С.І. Сучасний рентгеноструктурний аналіз реальних кристалів / С.І. Сидоренко, Р.І. Барабаш. – К.: Наукова думка, 1997. – 367 с.
2. Уманский Я.С. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. – М.: Металлургия, 1982..
3. Уманский Я.С. Рентгенография металлов и полупроводников. – М.: Металлургия, 1969. .
4. Васильев Д.М. Дифракционные методы исследования структур. – Санкт-Петербург, 1998.
5. Структура и физические свойства твердого тела. Лабораторный практикум под редакцией доктора физико-математических наук, профессора Л.С. Палатника. – М.: Металлургия, 1983.
6. Миркин Л.И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. – М.: Металлургия, 1969.
7. Физика твердого тела. Спецпрактикум. Под редакцией А.А. Кацнельсона и Г.С. Кринчика. – Изд. Московского университета, 1982.
8. Д.М. Хейкер и Л.С. Зевин. Рентгеновская дифрактометрия. – Государственное издательство физико-математической литературы, М., 1963.
9. М.М. Уманский. Сборник задач по рентгеноструктурному анализу. – Издательство Московского университета, 1975.
10. В.Д. Федорів, І.П. Яремій, В.В. Мокляк. Дифракційні методи дослідження кристалічної структури твердих тіл. Лабораторний практикум. – Івано-Франківськ: Гостинець, 2009.
11. В.П. Кладько, О.М. Єфанов, В.Ф. Мачулін, В.Ю. Молодкін Динамічна дифракція Х-променів в багатошарових структурах. – Київ: Наукова думка, 2009. – 219 с.
12. Пинскер З. Г. Рентгеновская кристаллооптика / З. Г. Пинскер. – М.: Наука, 1982. – 390 с.
13. Иверонова В.И., Ревкевич Г.П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. Учебное пособие. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1978. — 278 с.

Допоміжна

14. Русаков А.А. Рентгенография металлов. – М.: Атомиздат, 1977.
15. Эндрюс К.И. Электронограммы и их интерпретация (перев. с англ.). – М.: Мир, 1971.
16. Жданов Г.С. Дифракционный и резонансный структурный анализ. – М.: Наука, 1980.