

ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ імені ІВАНА ФРАНКА

Кафедра (циклова комісія) фізики металів

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан фізичного факультету \_\_\_\_\_

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ****ДИФРАКЦІЙНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ МАТЕРІАЛІВ**

\_\_\_\_\_ (шифр і назва навчальної дисципліни)  
галузь знань 0402 Фізико-математичні науки  
(шифр і назва галузі знань)  
напрямок підготовки 6.040204 - прикладна фізика  
(шифр і назва напрямку підготовки)  
спеціальність \_\_\_\_\_  
(шифр і назва спеціальності)  
спеціалізація \_\_\_\_\_  
(назва спеціалізації)  
факультет, відділення фізичний, денне  
(назва факультету, відділення)

2017 – 2018 навчальний рік

Робоча програма ДИФРАКЦІЙНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ МАТЕРІАЛІВ  
(назва навчальної дисципліни)

для студентів за напрямом підготовки 6.040204 - прикладна фізика, спеціальністю \_\_\_\_\_.

Розробники: Штаблавий І.І., доцент кафедри фізики металів, кандидат  
фізико-математичних наук

(вказати авторів, їхні посади, наукові ступені та вчені звання)

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри (предметної комісії) \_\_\_\_\_

Протокол від “ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ року № \_\_\_\_\_

Завідувач кафедри фізики металів \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ (підпис) (Мудрий С.І.)  
\_\_\_\_\_ (прізвище та ініціали)  
“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ року

Схвалено Вченою радою факультету

Протокол від “ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ року № \_\_\_\_\_

“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20\_\_ року Голова \_\_\_\_\_ (Якібчук П.М.)  
\_\_\_\_\_ (підпис) (прізвище та ініціали)

© \_\_\_\_\_, 20\_\_ рік  
© \_\_\_\_\_, 20\_\_ рік

## 1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
		<i>денна форма навчання</i>
Кількість кредитів — 3	Галузь знань <b>0402</b> <b>Фізико-математичні науки</b>	Нормативна
Модулів — 1	Напрямок підготовки <b>6.040204</b> <b>Прикладна фізика</b>	<i>Рік підготовки:</i> <b>3-й</b>
Змістових модулів — 2		<i>Семестр</i> <b>6-й</b>
Загальна кількість годин — <b>90</b>		<i>Лекції</i> <b>16 год.</b>
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних — 2 самостійної роботи студента — 3,6	Освітньо-кваліфікаційний рівень: <b>бакалавр</b>	<i>Практичні, семінарські</i> —
		<i>Лабораторні</i> <b>16 год.</b>
		<i>Самостійна робота</i> <b>58 год.</b>
		<i>Вид контролю:</i> <b>залік</b>

## **2. Мета та завдання навчальної дисципліни**

Отримання інформації про структуру речовини – необхідний і найбільш трудомісткий етап створення нових матеріалів і технологій, які визначають технічний прогрес всіх напрямів людської діяльності.

В програмі представлено основні дифракційні методи дослідження матеріалів, з більш детальним висвітленнями методу рентгеноструктурного аналізу який є на даний час одним з найбільш широко розповсюджених і доступних методів дослідження кристалічної структури, якісного і кількісного аналізу, складу досліджуваної речовини та його зміни при зовнішніх впливах.

**Мета:** Ознайомлення студентів з основними принципами та методами дифракційного аналізу атомної структури кристалічних матеріалів, поглиблення уявлень про фізичні явища, які лежать в основі представлених в курсі методів дослідження структури речовини. Ознайомлення студентів з основними можливостями і обмеженнями цих методів і закріплення цих знань в процесі самостійної роботи на сучасному обладнанні.

### **Завдання:**

1. Засвоєння студентами теоретичних основ і можливостей сучасних методів дослідження структури та особливостей сучасної апаратури.
2. Формування цілісних уявлень про основні методи що застосовуються в структурних дослідженнях.
3. Ознайомлення студентів з сучасними тенденціями в розвитку експериментальної бази рентгеноструктурних досліджень і математичного забезпечення для обробки експериментальних даних.

В результаті вивчення даного курсу студент повинен

### **знати:**

1. основні фізичні процеси що відбуваються при взаємодії рентгенівських променів, електронів та нейтронів з речовиною.
2. теорію та практику дослідження структури моно- та полікристалів методами дифракції рентгенівських променів.
3. математичні методи обробки результатів дифракційного експерименту.

### **вміти:**

1. будувати основні кристалографічні проекції монокристалів та визначати індекси площин.
2. проводити розшифровку рентгенограм моно- та полікристалів.
3. користуватися фізичною апаратурою та свідомо проводити експериментальні дослідження; обробляти результати експериментів, застосовувати здобуті знання на практиці.

## **МОДУЛЬ 1**

### ***Змістовий модуль 1. Рентгенівські промені та їх взаємодія з речовиною.***

#### **Тема 1. Рентгенівські промені.**

Вступ. Відкриття рентгенівських променів. Дифракція рентгенівських променів і структура матеріалів. Основні історичні етапи структурних досліджень. Спектр рентгенівського випромінювання. Неперервний і лінійчастий спектр. Джерела та реєстрація рентгенівського випромінювання.

#### **Тема 2. Взаємодія рентгенівських променів з речовиною**

Основні закономірності будови кристалів. Симетрія кристалів. Елементи кристалохімії.

Дифракція рентгенівських променів у кристалах. Поняття про інтерференцію і дифракцію. Геометрія дифракційної картини. Атомний ряд. Атомна площина. Трьохмірна примітивна ґратка.

#### **Тема 3. Дифракція рентгенівських променів.**

Формула Вульфа-Брега. Умови Лауе. Відповідність умов Лауе рівнянню Вульфа-Брега. Правила погасання.

#### **Тема 4. Обернена ґратка.**

Опис дифракції за допомогою оберненої ґратки. Побудова оберненої ґратки та її властивості. Інтерференційне рівняння. Сфера відбивання.

### ***Змістовий модуль 2. Методи дослідження структури матеріалів.***

#### **Тема 5. Методи дослідження структури монокристалів: метод Лауе, метод обертання монокристалу.**

Метод Лауе. Геометрія дифракційної ґратки. Зональні криві. Симетрія лауеграм. Інтерпретація лауеграм на основі оберненої ґратки.

Метод обертання монокристала. Шарові лінії. Симетрія рентгенограм обертання. Визначення періодів ідентичності вздовж осі обертання.

#### **Тема 6. Метод Дебая-Шерера.**

Метод Дебая Шерера. Індесування дебаєграм: графічні і аналітичні методи. Комп'ютерні методи індесування. Прецизійне вимірювання параметрів кристалічної ґратки. Аналіз похибок у визначенні міжплощинних віддалей. Методи екстраполяції.

#### **Тема 7. Метод рентгенівської дифрактометрії.**

Метод рентгенівської дифрактометрії. Розв'язування задач структурного аналізу на дифрактометрії. Якісний та кількісний рентгенографічний аналіз. Експериментальні умови отримання рентгенограм при фазовому аналізі. Ідентифікація фаз. Приставки і високотемпературні камери для здійснення структурних досліджень. Високотемпературні дифрактометричні дослідження.

#### **Тема 8. Інші методи дифракційних досліджень.**

Метод мало кутового розсіяння рентгенівських променів та нейтронів. Дослідження структури неупорядкованих систем методом дифракції рентгенівських променів, електронів та нейтронів.

#### 4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усьо-го	у тому числі				
л		п	лаб	інд	ср	
1	2	3	4	5	6	7
<b>МОДУЛЬ 3</b>						
<b>Змістовий модуль 1. Рентгенівські промені та їх взаємодія з речовиною.</b>						
Тема 1. Рентгенівські промені.		2	–	2		
Тема 2. Взаємодія рентгенівських променів з речовиною		2	–	2		
Тема 3. Дифракція рентгенівських променів.		2	–	2		
Тема 4. Обернена ґратка.		2	–	2		
Разом – зм. модуль 1		8	–	8		30
<b>Змістовий модуль 2. Методи дослідження структури кристалів.</b>						
Тема 5. Методи дослідження структури монокристалів: метод Лауе, метод обертання монокристалу.		2	–	2		
Тема 6. Метод Дебая-Шерера.		2	–	2		
Тема 7. Метод рентгенівської дифрактометрії.		2	–	2		
Тема 8. Інші методи дифракційних досліджень		2	–	2		
Разом – зм. модуль 2		8	–	8		28
Усього годин		16	–	16		58

#### 7. Темі лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	К-сть годин
1	Рентгенівський якісний фазовий аналіз.	4
2	Визначення розмірів і типу елементарної комірки кристалічної ґратки на полікристалічному зразку.	4
3	Визначення просторових груп симетрії кубічних кристалів з рентгенограм полікристалів.	4
4	Прецизійне визначення параметрів елементарної комірки полікристалів.	4
9	<b>Всього за семестр</b>	16

## 8. Самостійна робота

### лекцій, практичні

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Дифрактометри. Схема Брега-Брентано та Дебая-Шерера.	4
2	Основні похибки рентгенографічних вимірювань.	4
3	Інтенсивність дифракційних максимумів. Структурна амплітуда.	4
4	Побудова теоретичної дифрактограми.	4
5	Повнопрофільний аналіз.	4
6	Динамічна дифракція рентгенівських променів в ідеальних кристалах.	4
7	Дослідження особливостей дзеркального відбивання рентгенівського випромінювання від довільних багаточарових структур.	4
8	Дзеркальне відбивання рентгенівських променів в умовах ковзаючої дифракції.	4
9	Визначення структури кристалів методом Фур'є на основі рентгенодифрактометричних досліджень.	4
10	Рентгенографічні методи дослідження структури некристалічних об'єктів.	4
11	Застосування методу рентгенівської дифрактометрії для вирішення проблем матеріалознавства.	4
	<b>Всього за семестр</b>	<b>44</b>

### лабораторні

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Індиціювання рентгенограм аналітичним методом. Кубічна сингонія.	3
2	Індиціювання рентгенограм аналітичним методом. Середні сингонії: тетрагональна і гексагональна.	3
3	Індиціювання рентгенограм методом гомології.	3
4	Рентгенівська топографія в розхідному пучку.	3
5	Одержання та розрахунок рентгенограм від нерухомого монокристалу.	2
6	Дослідження структури кристалів методами обертання або коливання.	2
	<b>Всього за семестр</b>	<b>14</b>

## 10. Методи контролю

Контроль засвоєння матеріалу включає:

- 1) контроль за виконанням лабораторних робіт шляхом допуску до лабораторної роботи (5 балів), захист лабораторних робіт (20 балів). Сумарна оцінка, таким чином, виставляється за 100-бальною шкалою.

## **11. Розподіл балів, що присвоюється студентам**

**Розподіл балів, які отримують студенти (для заліку)**

лабораторне тестування та самостійна робота				Сума
Змістовий модуль Т1		Змістовий модуль Т2		
25	25	25	25	100

T1, T2 ... T9 – теми змістових модулів

### **Шкала оцінювання: Університету, національна та ECTS**

Оцінка в балах	Оцінка ECTS	Визначення	За національною шкалою	
			Екзаменаційна оцінка, оцінка з диференційованого заліку	Залік
90–100	<b>A</b>	<i>Відмінно</i>	<i>Відмінно</i>	<i>Зараховано</i>
81-89	<b>B</b>	<i>Дуже добре</i>	<i>Добре</i>	
71-80	<b>C</b>	<i>Добре</i>		
61-70	<b>D</b>	<i>Задовільно</i>	<i>Задовільно</i>	
51-60	<b>E</b>	<i>Достатньо</i>		

## **12. Методичне забезпечення**

1. Р.В.Шпанченко и М.Г.Розова Рентгенофазовый анализ. Методическая разработка для спецпрактикума к курсу лекций “Практические аспекты рентгеновской дифрактометрии” М. – 1998, 25 с.

## **13. Рекомендована література**

Базова

1. Vitalij K. Pecharsky, Peter Y. Zavalij Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials Springer 2005, 713p. с.
2. В.А. Лиопо, В.В. Война Рентгеновская дифрактометрия Гродно 2003, 171с.
3. А. А. Русаков Рентгенография металлов М.: Атомиздат 1977, 480с.
4. Rene Guinebretiere X-ray Diffraction by Polycrystalline Materials Hermes Science, 2007
5. Г. П. Кушта Рентгенографія металів Видавництво Львівського університету, 1959 386

Додаткова

1. А. И. Китайгородский Рентгеноструктурный анализ М., 1950 650с.
2. А. И. Китайгородский Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел. М.: 1952 588 с.
3. А. Ф. Скрышевский Дифракция рентгеновских лучей, электронов и нейтронов в газах и строение молекул Изд-во киевского университета, 1961, 85 с.
4. Б. К. Вайнштейн Современная кристаллография (в 4 томах) М.: Наука, 1979.

## **14. Інформаційні ресурси**

1. Wikipedia. <http://www.wikipedia.org>