

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ:
Декан физического факультета
С.Н.Филимонов

Рабочая программа дисциплины

Рентгеноструктурный анализ

по направлению подготовки

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки:
«Фундаментальная физика»

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр

Год приема
2023

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
О.Н. Чайковская

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2023

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-2 Способен проводить научные исследования физических объектов, систем и процессов, обрабатывать и представлять экспериментальные данные.

ПК-1 Способен проводить научные исследования в выбранной области с использованием современных экспериментальных и теоретических методов, а также информационных технологий.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 2.2 Анализирует и интерпретирует экспериментальные и теоретические данные, полученные в ходе научного исследования, обобщает полученные результаты, формулирует научно обоснованные выводы по результатам исследования

ИПК 1.1 Собирает и анализирует научно-техническую информацию по теме исследования, обобщает научные данные в соответствии с задачами исследования

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить физические представления о природе и свойствах рентгеновского излучения, кинематическую и динамические теории рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах, основные методы рентгеноструктурного анализа.

– Научиться применять физические представления и методы рентгеноструктурного анализа в решении практических и теоретических задач профессиональной деятельности..

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Пятый семестр, зачет

Шестой семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: линейная алгебра; аналитическая геометрия; математический анализ; дифференциальные уравнения.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 7 з.е., 252 часа, из которых:

– лекции: 80 ч.;

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Часть I. Теория дифракции рентгеновских лучей и методы наблюдения.

Раздел 1. Природа и свойства рентгеновского излучения.

Тема 1.1. Природа рентгеновского излучения.

Введение (историческая справка). Природа рентгеновских лучей. Преломление, отражение, поляризация. Источники и интенсивность рентгеновского излучения. Процесс образования рентгеновских лучей. Непрерывные спектры (спектры тормозного излучения). Характеристические (линейчатые) спектры. Закон Мозли. Роль структурного анализа в исследовании кристаллов.

Тема 1.2. Прохождение рентгеновских лучей через вещество.

Взаимодействие рентгеновских лучей с веществом. Коэффициенты ослабления рентгеновских лучей. Линейный коэффициент ослабления РЛ. Массовый коэффициент ослабления РЛ. Атомный коэффициент ослабления РЛ. Электронный коэффициент ослабления РЛ. Зависимость поглощения РЛ от длины волны и природы (атомного номера) элемента. Некоторые приложения (Устранение линии К α . Выделение узкой спектральной полосы при помощи «двойного фильтра Росса»).

Раздел 2. Кинематическая теория рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах.

Тема 2.1. Функция атомного рассеяния.

Рассеяние лучей свободным электроном. Формула Томсона. Когерентное и некогерентное рассеяние лучей. Фактор атомного рассеяния (атомный фактор): рассеяние атомами решетки; рассеяние беспорядочным скоплением атомов (разреженный газ).

Тема 2.2. Рассеяние рентгеновских лучей кристаллом.

Введение (цель, основные допущения теории Лауэ). Интерференция рентгеновских лучей. Уравнение Вульфа – Брэгга. Амплитуда рассеяния рентгеновских лучей кристаллом малого размера. Уравнение Лауэ. Интерференционная функция для рассеяния рентгеновских лучей кристаллом. Свойства интерференционной функции Лауэ. Интерференционная функция в обратном пространстве. Сфера Эвальда и ее построение. Связь размера и формы узла обратной решетки с размером и формой кристалла.

Тема 2.3. Дифракция на сложной решетке.

Структурная амплитуда и структурный множитель. Примеры расчета структурного множителя. Примитивная решетка. Объемно-центрированная решетка. Гранецентрированная решетка. Решетка алмаза. Погасания отражений, характеризующие пространственные группы. Интегральные погасания. Сериальные погасания. Зональные погасания. Структурный фактор, как Фурье-образ распределения электронной плотности в ячейке кристалла.

Тема 2.4. Основополагающие принципы методов рентгеноструктурного анализа.

Принципы методов рентгеноструктурного анализа. Метод Лауэ. Метод вращения. Метод Косселя. Метод порошка (метод Дебая — Шеррера). Рентгеновская дифрактометрия. Дифрактометрия монокристаллов. Дифрактометрия поликристаллов. Обзор современного оборудования и возможных методов дифрактометрии.

Тема 2.5. Интегральная отражательная способность.

Интегральное отражение, как мера рассеивающей способности кристалла. Мозаичный кристалл. Допущения кинематической теории рассеяния рентгеновских лучей. Интегральное отражение для идеально мозаичного кристалла. Интегральное отражение от поликристалла (кристаллических порошков). Учет поглощения. Абсорбционный фактор. Частные случаи конкретных форм образцов. Образец в форме плоской бесконечно протяженной пластинки толщиной d . Съемка на отражение (геометрия Брэгга), случай симметричного отражения. (б) съемка на отражение (геометрия Брэгга), случай

несимметричного отражения. (в) съемка на просвет (геометрия Лауэ), случай симметричного отражения. (г) съемка на просвет (геометрия Лауэ), случай несимметричного отражения. Цилиндрические и сферические образцы. Влияние температурных колебаний узлов решетки на рассеяние рентгеновских лучей. Вычисление температурного множителя для кубического кристалла по методу Дебая.

Раздел 3. Динамические теории рассеяния рентгеновских лучей.

Тема 3.1. Динамическая теория Дарвина.

Введение. (1) Динамическая теория Дарвина. (2) Динамическая теория Эвальда. Основы динамической теории Дарвина. Поправка на преломление. Отклонения от закона Вульфа-Брэгга. Отражение от семейства кристаллических плоскостей с учетом многократных отражений. Отражение от семейства плоскостей по Дарвину без учета поглощения лучей. Область полного отражения от грани малопоглощающего кристалла. Интегральная отражательная способность идеального кристалла.

Тема 3.2. Основы динамической теории Эвальда-Лауэ.

Поправка на первичную экстинкцию в динамической теории Дарвина. Основные положения теории Эвальда – Лауэ. Одноволновой случай в динамической теории. Дисперсионные поверхности. Двухволновой случай: два узла обратной решетки на сфере Эвальда. Уравнение поверхностей дисперсии. Неограниченный кристалл. Положение центров распространения. Ограниченный кристалл. Случай Лауэ. Соотношения между амплитудами и фазами волн, принадлежащих одному центру распространения.

Часть II. Применение рентгеноструктурного анализа к исследованию кристаллических материалов.

Раздел 4. Применение рентгеноструктурного анализа к исследованию кристаллических материалов.

Тема 4.1. Связь узлов обратной решетки с размером и формой кристалла.

Амплитуда волны, рассеянной ограниченным кристаллом. Интенсивность волны, рассеянной ограниченным объектом. Профиль линии идеального поликристалла, обусловленный размерами областей когерентного рассеяния.

Тема 4.2. Дифракция на малых кристаллах.

Реальный кристалл. Области когерентного рассеяния. Дифракция на кристаллах с малыми размерами областей когерентного рассеяния. Ширина области отражения. Способы определения ширины рентгеновской линии. Ширина рентгеновской линии на $\frac{1}{2}$ высоты максимума. Интегральная ширина рентгеновской линии. Размытие линии поликристаллического материала, обусловленное микродеформацией решетки.

Тема 4.3. Анализ профиля и ширины рентгеновской линии.

Связь между интегральными ширинами линий исследуемого образца и эталона. Метод аппроксимаций. Анализ формы интерференционной линии (гармонический анализ). Случай размытия, обусловленного мелкодисперсностью. Случай размытия, обусловленного только наличием микронапряжений в образце. Алгоритм метода Экспериментальное использование метода ГАФРЛ. Условия экспериментального использования метода ГАФРЛ. Разделение Ка- дублета: Графический метод. Метод Речингера. Метод моментов. Момент функции первого порядка, его геометрический (физический смысл). Момент функции второго порядка, его геометрический (физический смысл). Частные случаи формул для моментов: Уширение профиля РЛ за счет малости

блоков; Уширение профиля РЛ за счет микроискажений. Инструментальное уширение профиля РЛ. Методики нахождения размеров ОКР и величины микроискажений, основанные на методе моментов: Метод моментов второго порядка по двум порядкам отражений от одного семейства плоскостей. Метод четвертого момента.

Тема 4.4. Общая теория дифракции лучей в несовершенном кристалле.

Кристаллические несовершенства 1-го и 2-го рода. Общие формулы дифракции несовершенным кристаллом, выводимые из представлений о средней решетке. Несовершенства, вызывающие расширение областей отражения. Выражение для профиля дифракционных порошковых линий. Интенсивность диффузного рассеяния. Интерпретация результатов диффузного рассеяния от несовершенных кристаллов.

Тема 4.5. Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах с дефектами упаковки.

Исследование кристаллов с дефектами упаковки. Дефекты упаковки в ГЦК кристаллах. Общие закономерности диффузного рассеяния, связанные с наличием ДУ. Дефекты упаковки в ОЦК кристаллах. Дефекты упаковки в ГПУ кристаллах.

Тема 4.6. Рассеяние лучей твердыми растворами.

Исследование сверхструктуры в решетке твердого раствора. Определение параметра ближнего порядка в твердых растворах. Эффекты диффузного рассеяния, обусловленные наличием ближнего порядка в твердых растворах. Особенности экспериментального исследования диффузного рассеяния.

Тема 4.7. Рассеяние рентгеновских лучей стареющими сплавами.

Эффекты диффузного рассеяния в стареющих сплавах. Методы наблюдения эффектов диффузного рассеяния в стареющих сплавах.

Тема 4.8. Применение рентгеноструктурного анализа для изучения физических свойств материалов.

Рентгеновские методы определения остаточных напряжений: Одноосное растяжение. Объемно – напряженное состояние. Плосконапряженное состояние. Раздельное определение главных напряжений σ_1 и σ_2 . Рентгеноструктурный анализ поверхностных слоев материалов методом скользящего пучка. Рентгеновская дилатометрия, определение коэффициентов теплового расширения для изучения фазовых переходов, алгоритм метода. Исследование процессов рекристаллизации. Определение толщины покрытия на кристаллической подложке. Рентгеновский анализ текстур. Виды текстур. Метод Харриса исследования текстур. Нормировка А. Вильсона с учетом фактора повторяемости. Нормировка П. Морриса. Методы определения ориентировки кристаллов. Определение ориентировки в методе Лауэ. Определение ориентировки на дифрактометре. Метод микрополюсных фигур. Прецизионное определение параметров решетки. Определение остаточных напряжений.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, тестов по лекционному материалу, зачетов по лабораторным работам в количестве, соответствующем учебному плану, и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр. Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет в пятом семестре проводится в письменной форме по билетам. Билет содержит два теоретических вопроса. Продолжительность зачета 1,5 часа. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle»

-РСА, часть 1: <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=21970>

-РСА, часть 2: <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=21969>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) План лекционных занятий по дисциплине.

г) Методические указания по изучению конкретных тем дисциплины.

д) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Гинье А. Рентгенография кристаллов. М.: Физматгиз, 1961. – 604 с.

– Горелик С.С., Скаков Ю.А., Расторгуев Л.Н. Рентгенографический и электронографический анализ металлов. М.: Metallurgizdat, 1980. - 351 с.

– Савицкая Л.К. Методы рентгеноструктурных исследований. Учебное пособие. Томск.: Изд-во Том.ун-та, 2003. – 255 с.

– Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей в кристаллах. М.: ИЛ, 1955. - 572 с.

– Вишняков Я.Д. Современные методы исследования структуры деформированных кристаллов. М.: Metallurgia, 1975. - 480 с.

– Уманский Я.С. Рентгенография металлов. М.: Metallurgia, 1967. – 235 с.

– Уоррен Б. Рентгенографическое излучение деформированных металлов // Успехи физики металлов. М.: Metallurgizdat, 1963. - Т.5. - С. 172-237.

– Лавров Л., Буфер М.Дж. Метод порошка в рентгенографии. М.: ИЛ., 1961. – 380 с.

– Бородкина М.М., Спектор Э.М. Рентгенографический анализ текстуры металлов и сплавов. М.: Metallurgizdat, 1970. - 351 с.

– Блохин М.А. Физика рентгеновских лучей. М.: Госуд. изд-во техн. теор. литературы, 1957. – 518 с.

– Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Metallurgia, 1982. – 632 с.

– Иверонова В.И., Ревкевич П.П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. М.: Изд-во МГУ, 1972.

б) дополнительная литература:

– Утевский Л.М. Дифракционная электронная микроскопия в металловедении. М.: Metallurgia, 1973. - 584 с.

– Калитиевский Н.И. Волновая оптика. М.: Наука, 1971. - 373 с.

– Фульц Б. Просвечивающая электронная микроскопия и дифрактометрия материалов / Б. Фульц, М. Хау Дж. – Москва: Техносфера, 2011. – 904 с.

– Китайгородский А.И. Рентгеноструктурный анализ. – М.: Физматгиз, 2012.

17. Жданов Г. С. Основы рентгеновского структурного анализа М.: Физматгиз. 2012. – 448с.

в) ресурсы сети Интернет:

- Издательство «Лань» [Электронный ресурс] : электрон.-библиотечная система. – Электрон. дан. – СПб., 2010- . – URL: <http://e.lanbook.com/>
- Издательство «Юрайт» [Электронный ресурс] : электрон.-библиотечная система. – Электрон. дан. – М., 2013- . URL: <http://www.biblio-online.ru/>
- Электронно-библиотечная система Znanium.com [Электронный ресурс] / Научно-издательский центр Инфра-М. – Электрон. дан. – М., 2012- . URL: <http://znanium.com/>
- Электронно-библиотечная система Консультант студента [Электронный ресурс] / ООО «Политехресурс». - М, 2012- . – URL: <http://www.studentlibrary.ru/>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ [Электронный ресурс] . – Электрон. дан. – Томск, 2011-. URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- Электронный каталог [Электронный ресурс] / НИ ТГУ, Научная библиотека ТГУ. – Электрон. дан. – Томск, 2008-2016. – URL: <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?theme=system>
- Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000- . – URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp?>
- КонсультантПлюс [Электронный ресурс]: справ. правовая система. – Электрон. дан. – М., 1992- . – Доступ из локальной сети Науч. б-ки Том. гос. ун-та.
- Гарант [Электронный ресурс] : информ.-правовое обеспечение / НПП «Гарант-Сервис». – Электрон. дан. – М., 2016. – Доступ из локальной сети Науч. б-ки Том. гос. ун-та.
- ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>
- SpringerLink [Electronic resource] / Springer International Publishing AG, Part of Springer Science+Business Media. – Electronic data. – Cham, Switzerland, [s. n.]. – URL: <http://link.springer.com/>
- ProQuest Ebook Central [Electronic resource] / ProQuest LLC. – Electronic data. – Ann Arbor, MI, USA, [s. n.]. – URL: <https://ebookcentral.proquest.com/lib/tomskuniv-ebooks/home.action>
- <http://escher.epfl.ch/eCrystallography/>
- <http://www.iucr.org/>
- <http://database.iem.ac.ru/mincryst/rus/index.php>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook); системы компьютерной вёрстки LaTeX; системы компьютерной алгебры Wolfram Mathematica, Waterloo Maple;

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

в) профессиональные базы данных (*при наличии*):

– Университетская информационная система РОССИЯ – <https://uisrussia.msu.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешанном формате («Актру»).

15. Информация о разработчике

Мейснер Людмила Леонидовна, доктор физико-математических наук, профессор, кафедра физики металлов физического факультета ТГУ, профессор.