Программа учебной дисциплины

|  |  |
| --- | --- |
| Название дисциплины | Дифракционные исследования структуры и состава материалов |
| Где проводится | Базовая кафедра ФКС при ИФТТ РАН (Черноголовка) |
| Автор программы | Кузьмин Алексей Васильевич, к. ф.-м. н., снс ИФТТ РАН |
| Курс | 3-ый курс |
| Модули | 3-ый и 4-ой модули |
| Объём курса | 2 часа лекция и полчаса семинар в неделю |
| Элементы контроля | 1 контрольная работа, экзамен |

# 1. Аннотация курса

Целями изучения дисциплины являются:

* знакомство студентов с основными концепциями физики дифракции и ее применения для исследования структуры материалов;
* знакомство студентов с основами кристаллографии и методами изучения структуры и состава материалов (структурная рентгенография, электронная микроскопия, растровая электронная микроскопия, рентгеноспектральный анализ атомного состава материалов;
* овладение методами решения задач, описания физических явлений.

Необходимыми для изучения дисциплины пререквизитами являются:

* кристаллография
* физика дифракции

В результате освоения настоящего учебного пособия студент или аспирант должен:

* знать предмет, цели, задачи и возможности дифракционных методов исследования структуры материалов; физические основы теории рассеяния; особенности рассеяния рентгеновских лучей, электронов, тепловых нейтронов; методологические принципы дифракции; требования к исследуемым образцам и оборудованию; современные представления о Фурье-анализе; историю, современное состояние и тенденции развития дифракционных методов исследования;
* уметь анализировать и интерпретировать результаты дифракционных эксперименто; обобщать и систематизировать параметры структурных исследований; анализировать и интерпретировать дифракционные изображения; разрабатывать и осуществлять схемы дифракционных исследований; решать задачи, связанные с анализом дифракционных изображений (лауэграмм, дебаеграмм, дифрактограмм и пр.); применять теоретические знания к анализу и интерпретации дифракционных изображений структур; ориентироваться в современной дифрактометрической технике; выбирать необходимые методы, схемы, подходы для решения структурных задач;
* владеть современными технологиями и методами структурных исследований материалов; навыками системного анализа полученных дифракционных данных; навыками поиска информации, необходимой для интерпретации результатов дифракционных исследований; навыками работы с учебной и научной литературой по структурным исследованиям; навыками работы с компьютерными базами данных, возникающих в ходе структурных экспериментов.

# 2. Программа курса

Список тем дисциплины «Дифракционные исследования структуры и состава материалов»:

* Геометрическая кристаллография

(историческая справка, основные понятия геометрической кристаллографии, методы изображения и описания элементов кристаллической решетки, индексы Миллера, обратная решетка и её свойства, кристаллографические зоны, кристаллографические проекции, симметрия кристаллической решетки. основные понятия о симметрии, кристаллографические системы, решетки Бравэ, основные симметрические операции, точечные группы симметрии, трансляционная симметрия, кристаллографические обозначения элементов симметрии, пространственные группы симметрии)

* Введение в физику рассеяния рентгеновских волн

(основы физики дифракции, рентгеновские лучи, рассеяние рентгеновских лучей на свободных электронах, рассеяние рентгеновских лучей на трехмерной периодической кристаллической решетке (кинематическое приближение). интерференционная функция Лауэ (функция распределения межатомных расстояний, рассеяние на молекулах разреженного газа. уравнение Дебая), геометрическая интерпретация дифракции по Эвальду, рассеяние на сложной решетке (решетка с базисом), интерпретация явлений дифракции на основе понятий прямой и обратной решеток, влияние температуры на амплитуду рассеяния. температурный фактор рассеяния, рассеяние рентгеновских волн на объектах с неупорядоченной структурой, атомный фактор рассеяния (рассеяние рентгеновских лучей на электронах атомных оболочек; атомный фактор рассеяния для электронов; амплитуда атомного рассеяния для нейтронов, основы динамической теории рассеяния).

* Введение в рентгеноструктурный анализ

(методы анализа дифракционной картины. получение структурных параметров исследуемого материала, основные сведения о типе структур материалов, анализ геометрии дифракционной картины, наиболее распространённые фотометоды рентгеноструктурного анализа (метод лауэграмм; метод рентгенограмм вращения (качания); методы рентгеновского гониометра; методы исследования поликристаллических образцов - метод Дебая-Шеррера), методы рентгеновской дифрактометрии. (дифрактометры для исследования поликристаллов; дифрактометры для монокристаллов; методы сканирования узла обратной решетки), влияние геометрических параметров эксперимента на величину измеренных интенсивностей дифракционных отражений, поляризационный фактор и фактор Лоренца; уширение дифракционного рефлекса; фактор повторяемости в структурном анализе поликристаллов, анализ массивов интенсивностей дифракционных рефлексов, фазовая проблема структурного анализа; роль фазы в синтезе Фурье; метод проб и ошибок; функции Паттерсона; аналитические методы прямого определения фаз, исследование формы и тонкой структуры дифракционных рефлексов, интегральные методы исследования реальной структуры, введение в методы исследования дефектов в кристаллах, дефекты кристаллической структуры и их роль в формировании макроскопических свойств твердого тела, основные принципы рентгеновской топографии)

# 3. Элементы контроля и правила оценивания

Оценка за курс складывается из накопленной части (Н) и оценки за экзамен (Э).

1. Итоговая оценка (ИО) вычисляется по формуле:
2. ИО = 0.5 ‧ Н + 0.5 ‧ Э,

округление при вычислении итоговой оценки производится по арифметическим правилам (дробная часть меньше 0.5 округляется в меньшую строну).

1. Накопленная оценка (H) выставляется по результатам оценки за контрольную работу.
2. Каждая оценка (Н и Э) выставляется по 10-ти бальной шкале.
3. Контрольная работа проводится в письменной форме на одном из семинаров в конце первого модуля курса и содержит задачи по изученным темам. При оценке работы могут учитываться объяснения студента по применяемым подходам и методам решения. Длительность контрольной работы 3 часа.
4. Экзамен проводится в форме письменной контрольной работы по всем темам курса.

## 4. Примеры заданий элементов контроля

Вариант контрольной работы

1. Определите тип обратной решетки Браве, если прямая решетка – гранецентрированная кубическаярешетка.
2. Что обозначает символ симметрии 3D44D36D2. Нарисовать соответствующую стереографическую проекцию.
3. Индексы Миллера. Что они отображают в прямом и обратном пространстве.
4. Обратная решетка. Основные аксиомы. Основные свойства обратной решетки.

Вариант экзаменационной работы

1. Точечные группы (ТГ) симметрии. Что отображают ТГ в кристаллах. Как выглядят на стереографической проекции группы симметрии mmm, 32, 2/m, 4/mm. Какие еще бывают группы симметрии в кристаллографии. Основные элементы симметрии пространственных групп.
2. Методы обработки и индицирования дебаеграмм. Какая первичная информация содержится на экспериментальной дебаеграмме. Какая информация получается в результате обработки дебаеграмм. Какими факторами определяется интенсивность линий на дебаеграмме.
3. Чему в прямой решетке соответствует точка в обратной решетке. Как определить по положению точки в обратной решетке межплоскостное расстояния в прямой решетке.

# 5. Рекомендованная литература и ссылки по теме

## 5.1. Основной список

1. Дж.Каули, Физика дифракции, Москва, Мир, 1976, с.432
2. Э.В. Суворов Методы исследования структуры и состава материалов, Москва, Юрайт, 2019, с.180
3. Э.В. Суворов Дифракционный структурны анализ
4. SBN 978-5-534-09995-9, Москва, Юрайт, 2019, с.273
5. В.И.Иверонова, Г.П.Ревкевич, Теория рассеяния рентгеновских лучей, Москва, МГУ, 1978, с.277

## 5.2. Дополнительный список

1. А.А.Харкевич, Спектры и анализ, Москва, ГИ Физ.Мат.Лит.1962, с.234
2. Г.Пейн Физика колебаний и волн, Москва, Мир, 1979, с.390
3. Г.С.Жданов, Основы рентгеноструктурного анализа, Москва, Гостехиздат, 1940, с.446
4. Бокий, Г. Б. Рентгеноструктурный анализ / Г. Б. Бокий, М. А. Порай-Кошиц. — М. : Изд-во МГУ, 1963.
5. М.Гинье, Рентгенография кристаллов, Москва, Физматгиз, 1961, с.604
6. Я.С.Уманский, Рентгенография металлов, Москва, Металлургия, 1967, с.236
7. А.Ф.Скрышевский, Структурный анализ жидкостей, Москва, Мир, 1976, с.256
8. Калитеевский, Н. И. Волновая оптика / Н. И. Калитеевский. — М. : Наука, 1971