

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

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

Основы рентгеноструктурного анализа

по направлению подготовки

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки:
Фундаментальная и прикладная физика

Форма обучения
Очная

Квалификация
Бакалавр

Год приема
2025

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
С.Н. Филимонов

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2025

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

– Получить представления о физике рентгеновского излучения, процессах и результатах взаимодействия рентгеновского излучения с веществом, основных методах наблюдения дифракции рентгеновских лучей и методах анализа экспериментальных данных (картины дифракции, дифрактограммы).

– Научиться анализировать экспериментальные данные, полученные с применением основных методов рентгеноструктурного анализа, для решения практических задач: определение параметров решетки вещества, механических напряжений, дефектности кристаллов и тонких пленок.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (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

Седьмой семестр, зачет

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: общая физика, математический анализ, аналитическая геометрия, векторная алгебра, теория вероятностей.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часа, из которых:

-лекции: 16 ч.

-практические занятия: 16 ч.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Физика рентгеновского излучения.

Взаимодействие электронного пучка с твердым телом. Генерация рентгеновского излучения. Природа и свойства излучения. Непрерывное (тормозное) излучение: механизм взаимодействия, спектральная характеристика, влияние параметров электронного пучка и свойств материала анода. Характеристическое излучение: механизм возникновения, спектр и его особенности, серии линий. Поглощение рентгеновского излучения веществом: основной закон ослабления лучей, коэффициента ослабления, зависимость от длины волны. Практические приложения закона.

Тема 2. Кинематическая теория рассеяния лучей в кристаллах.

Уравнение Вульфа-Брегга. Обратное пространство. Дифракционные индексы обратной решетки. Сфера Эвальда. Когерентное и некогерентное рассеяние. Рассеяние свободным электроном. Поляризация рассеянного излучения. Функция атомного рассеяния. Фурье-образ распределения электронной плотности атома. Его зависимость от длины волны, угла рассеяния, атомного номера рассеивающего вещества. Понятие об атомном рассеянии. Рассеяние ячейкой кристалла. Структурная амплитуда и структурный множитель. Дифракция на кристаллической решетке. Интерференционная функция. Уравнения Лауэ. Главные и побочные максимумы, нулевые значения. Дифракционное расширение узлов обратной решетки.

Тема 3. Методы наблюдения дифракции рентгеновских лучей.

Сфера ограничения. Метод вращения монокристалла. Метод Лауэ, определение ориентировки монокристалла. Метод порошка.

Тема 4. Отражательная способность кристалла.

Мозаичный кристалл. Выход интегральной отражательной способности с использованием обратного пространства. Интегральное отражение от поликристалла. Пределы применимости кинематической теории. Вторичная экстинкция. Понятие о динамической теории Дарвина. Первичная экстинкция. Поправки на поглощение лучей. Влияние тепловых колебаний атомов, тепловой множитель.

Тема 5. Анализ профиля рентгеновской линии.

Понятие функции профиля. Ширина линии, способы определения ширины. Области когерентного рассеяния (ОКР). Размытие максимумов за счет малости ОКР. Формула Шерера. Размытие максимумов за счет микронапряжений решетки. Инструментальная и физическая ширина линии. Профиль линии как свертка инструментального и физического уширения.

Тема 6. Методы определения размеров ОКР и микронапряжений решетки.

Метод аппроксимации. Разделение (d_1 - d_2) – дублета. Метод гармонического анализа-профиля (ГАФРЛ). Метод моментов.

Тема 7. Методы определения механических напряжений в гетероструктурах.

Определение и примеры гетероструктур. Причины и механизмы возникновения механических напряжений в гетероструктурах. Метод определения напряжений по измерению радиуса изгиба структуры.

Тема 8. Методы определения параметров решетки

Определение параметров элементарной ячейки кристалла для кубической, гексагональной и тетрагональной сингоний.

Тема 9. Методы определения дефектов в кристаллах.

Рентгеновская дифрактометрия. Рентгеновская топография. Определение плотности дислокаций. Оценки плотности точечных дефектов. Фазовый состав включений в кристаллах

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, опросов по лекционному материалу, выполнения домашних заданий (решение задач) 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 седьмом семестре проводится в письменной форме по билетам. Билет содержит теоретический вопрос и два контрольных вопроса. Продолжительность зачета 1 час. 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» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=25825>
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
- в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.
- г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
 - 1. Савицкая Л.К. Рентгеноструктурный анализ. Курс лекций, ч. 1. – Томск: изд-во Томского ун-та, 1982. – 172 с.
 - 2. Савицкая Л.К. Рентгеноструктурный анализ. Курс лекций, ч. 2. – Томск: изд-во Томского ун-та, 1990. – 157 с.
 - 3. Бублик В.Т., Дубровина А.Н. Методы исследования структуры полупроводников и металлов. – М.: Металлургия, 1978. – 272 с.
 - 4. Уманский Я.С. Рентгенография металлов и полупроводников. – М.: Металлургия, 1969.
 - 5. Суворов Э.В. Дифракционный структурный анализ. М.: изд. Юрайт, 2019.-272 с.
- б) дополнительная литература:
 - 1. Блохин М.А. Физика рентгеновских лучей. – М.: Гос. изд. техн.–теор. литер., 1957.–518 с.
 - 2. Гинье А. Рентгенография кристаллов. – М.: Физматгиз, 1961. – 604 с.
 - 3. Горелик С.С., Расторгуев Л.Н., Скаков Ю.А. Рентгеноструктурный и электроннооптический анализ металлов. – М.: Металлургиздат, 1970. – 352 с.
 - 4. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. – М.: Металлургия, 1982. – 632 с.
 - 5. Современная кристаллография. Т. 1. – Москва, 1979.
 - 6. Храмов А.С., Назипов Р.А.. Рентгеноструктурный анализ поликристаллов. Часть I (Учебно-методическое пособие к лабораторному практикуму). Казань: изд. КГУ, 2009. 46 стр.
 - 7. Богдан Т.В. Основы рентгеновской дифрактометрии. М.: изд. МГУ, 2012.-64 с.
 - 8. Семенов А.С., Лебедев М.П. Практика рентгеноструктурного анализа. М.: Academia, 2008. 112 стр.

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);
- 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/>

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.

Мультимедийное оборудование физического факультета ТГУ, компьютерный класс с доступом в интернет.

15. Информация о разработчиках

Ивонин Иван Варфоломеевич, доктор физ.-мат. наук, ТГУ, кафедра физики полупроводников, профессор.