

Аннотация

Б1.В.ДВ.9.1 Дифракционные методы исследования вещества

Цели и задачи исследования дисциплины (модуля)

Дифракционные методы - это раздел физики, посвященный получению информации о веществе из спектров электромагнитного излучения. В современной науке, технике дифракционные методы являются не только методами исследования, но и методами контроля качества материалов и технологических процессов, их синтеза и обработки, позволяющих осуществлять поэтапный мониторинг качества на разных этапах процессов. Разнообразие методов получения и регистрации дифракционных спектров определяет широкий диапазон применения их как для исследования структуры материалов, так и для контроля качества материалов, установления взаимосвязи структурных свойств

Цель изучения дисциплины заключается в фундаментальной подготовке дипломированных специалистов в области современных методов исследования структур материалов. Курс предназначен для студентов 4-го года обучения, специализирующихся в области физики конденсированного состояния.

Задачи дисциплины:

- теоретическое и практическое освоение на базе дисциплин циклов ЕН (Математика, Физика), ОПД (физика твердого тела, физика рентгеновских лучей, основы кристаллофизики, информационные технологии) теоретических основ дифракционных методов исследования вещества, экспериментальных методов рентгеноструктурного анализа, методов исследования структурных превращений при различных физических воздействиях.
- выработки у будущего специалиста комплекса навыков и знаний для использования основных дифракционных методов анализа как в области исследования структуры материалов, так и для контроля качества материалов.
- Программа ориентирована на развитие у студентов интереса к познанию взаимосвязи физических свойств кристаллических веществ с особенностями их структуры, приобретение навыков самостоятельного изучения фундаментальных основ экспериментальных методов измерения и их практических приложений.

Требования к результатам освоения дисциплины:

- способность использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин (ПК-1);
- способность проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта (ПК-2).

В результате изучения дисциплины студент должен:

знать: теоретические и физические основы дифракционных методов анализа вещества; базовые методики рентгеноструктурного анализа кристаллов; конструктивные особенности установок для рентгеноструктурного анализа;

уметь: осуществлять адекватный стоящей задаче выбор экспериментального метода исследования структурного состояния вещества; критически анализировать базовую общефизическую информацию; пользоваться теоретическими основами, основными понятиями, законами и моделями физики;

(ПК-2);

владеть: методами обработки и анализа экспериментальной и теоретической информации (ПК-1,2).

4. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы:

Вид учебной работы	Всего часов / зачетных	Семестры			
		8	-	-	-

	единиц				
Аудиторные занятия (всего)	70/1,94	70/1,94	-	-	-
В том числе:	-	-	-	-	-
Лекции	30/0,83	30/0,83	-	-	-
Практические занятия (ПЗ)	40/1,11	40/1,11	-	-	-
Коллоквиум	-	-	-	-	-
Лабораторные работы (ЛР)		-	-	-	-
Контроль самостоятельной работы (КСР)	8/0,22	8/0,22	-	-	-
Самостоятельная работа (всего)	30/0,83	30/0,83	-	-	-
В том числе:	-	-	-	-	-
Курсовой проект (работа)	-	-	-	-	-
Расчетно-графические работы	30/0,83	30/0,83	-	-	-
Реферат (при наличии)	-	-	-	-	-
<i>Домашние контрольные работы</i>			-	-	-
Вид аттестации зачет			-	-	-
Общая трудоемкость часы	108	108	-	-	-
зачетные единицы	3	3	-	-	-

Краткая характеристика содержания учебной дисциплины

Введение. Значение современных методов исследования структуры вещества, их классификация. Основные этапы структурного анализа. Дифракционные методы как методы мониторинга структурных особенностей конденсированных объектов в различных физических условиях.

Природа, свойства, получение и регистрация рентгеновского излучения. Свойства рентгеновского излучения и их практическое использование. Преломление рентгеновских лучей и его практическое использование (коллиматоры, параллельная оптика). Поляризация рентгеновских лучей. Интенсивность рентгеновского излучения. Методы защиты от воздействия ионизирующего излучения. Способы регистрации рентгеновских лучей, детекторы рентгеновского излучения.

Сплошной спектр рентгеновского излучения. Энергия спектра. Граничная частота. Факторы, влияющие на интенсивность сплошного спектра. Характеристический спектр. Получение характеристического излучения. Интенсивность характеристического излучения. Соотношение интенсивностей непрерывного и линейчатого спектров.

Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом. Виды взаимодействия. Когерентное рассеяние. Некогерентное рассеяние. Рентгеновская флюоресценция. Фотоэффект. Механизмы рассеяние и поглощение рентгеновского излучения.. Поглощение рентгеновского излучения. Край (скачок) полосы поглощения. Выбор излучения. Фильтры рентгеновского излучения. Физиологическое действие рентгеновского излучения.

Рассеяние рентгеновских лучей. Когерентное рассеяние рентгеновских лучей – основа рентгеноструктурного анализа. Рассеяние свободным электроном (классическая теория). Формула Томсона. Рассеивающая способность объекта. Рассеяние рентгеновских лучей двумя электронами. Интерференция. Дифракционный эффект. Рассеяние атомом. Атомная амплитуда, атомный фактор. Теоретический расчет фактора атомного рассеяния. Аномалии фактора атомного рассеяния. Понятие электронной плотности. Понятие рассеивающего центра.

Дифракция рентгеновского излучения в кристаллах. Кинематическое и динамическое приближения в теории дифракции. Рассеяние рентгеновских лучей группой атомов. Понятие единичного рассеивающего центра. Дифракция рентгеновских лучей в обратном пространстве. Построение Эвальда. Формула Вульфа –Брэгга. Обратное пространство идеального кристалла, аморфного объекта, поликристалла. Понятие структурной амплитуды.

Интенсивность дифракционных максимумов. Формулы структурной амплитуды для кристаллов с разными ячейками Браве. Преобразование формул при наличии элементов симметрии в кристалле. Факторы, влияющие на интенсивность рентгеновского луча. Фактор поляризации. Фактор Лоренца. Геометрический фактор. Фактор повторяемости. Температурный фактор. Фактор абсорбции. Практические приемы расчета структурной амплитуды и структурного фактора.

Методы расшифровки структуры кристаллов. Метод проб и ошибок. Принципы плотнейшей упаковки. Правила Полинга. Учет симметрии кристаллов при построении структурной модели. Использование физических свойств кристалла при построении моделей. Критерий выбора модели. Метод Фурье. Принципы метода. Физический смысл разложения электронной плотности в ряд Фурье. Определение положения атомов на распределении электронной плотности. Сечения и проекции электронной плотности. Практические приемы построения проекций электронной плотности. Метод Паттерсона (межатомная функция). Переход от пространства кристалла к векторному пространству. Проекция и сечения межатомной функции. Заострение максимумов межатомной функции. Удаление максимумов в начале координат. Использование различия в «весе» атомов при расшифровке распределения межатомной функции. Особенности межатомной функции. Квадратизированный кристалл. Сравнение методов расшифровки структуры кристаллов методами рентгеноструктурного анализа.

Сравнение методов структурного анализа. Характеристика возможностей и недостатков методов расшифровки структуры кристаллов. Современное состояние методов. Программное сопровождение методов структурного анализа.

Методы рентгеноструктурного анализа дисперсных систем. Методы рентгеноструктурного анализа поликристаллов. Метод Дебая. Представление метода в обратном пространстве. Техника получения рентгенограмм. Рентгеновские камеры и дифрактометры. Индексирование рентгенограмм поликристаллов аналитическим и графическим методами. Определение параметров элементарной ячейки кристаллов. Качественный фазовый анализ. Физические основы качественного фазового анализа. Требования к эксперименту. Картотека JCPDS. Количественный фазовый анализ. Физические основы количественного фазового анализа. Методы количественного фазового анализа. Чувствительность фазового анализа. Анализ структуры аморфных и дисперсных веществ. Ближний и дальний порядок. Функция радиального распределения. Рассеяние аморфными веществами, жидкостями и дисперсными системами.

Рентгенографические исследования микродеформаций и размеров ОКР. Классификация кристаллических дефектов по их влиянию на рентгенограмму. Анализ дефектов кристаллического строения по уширению рентгеновских линий. Методы выделения физического уширения. Методы разделения вклада дисперсности и микродеформации в физическое уширение.

Методы температурной рентгенографии. Задачи метода. Возможности температурной рентгенографии. Особенности низко- и высокотемпературной рентгенографии. Высоко и низкотемпературные камеры. Рентгеновская дилатометрия. Динамика термических изменений дисперсности и микродеформаций кристаллов.

Методы электронографии, нейтронографии в структурном анализе. Физические особенности методов электронографии, нейтронографии. Математический аппарат методов. Границы применения и сравнение с рентгенографическими методами.

Заключение. Роль структурных исследований в диагностике структурных особенностей кристаллических объектов и для развития общезначимых представлений о процессах в конденсированных средах. Связь дифракционной кристаллографии с другими разделами физики конденсированных сред.

Вид промежуточной аттестации: зачёт.

Разработчик:

к.ф.-м.н., доцент кафедры общей и экспериментальной физики Г.А.Кузнецова