

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Фізичний факультет

Кафедра фізики металів



**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**  
**“Diffraction methods in disordered materials”**

**для аспірантів**

галузь знань 10 Природничі науки  
(шифр і назва)  
спеціальність 104 Фізика та астрономія  
(шифр і назва спеціальності)  
освітній рівень доктор філософії  
(молодший бакалавр, бакалавр, магістр)  
освітня програма Фізика та астрономія  
(назва освітньої програми)  
вид дисципліни вибіркова

Форма навчання	<u>очна</u>
Навчальний рік	<u>2018/2019</u>
Семестр	<u>2</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>4</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>іспит</u>

Викладачі: професор Семенько Михайло Петрович

(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 2019/2020 н.р.  (Оліх О.Я.) «10» 05.2019 р. №21  
(підпис, ПІБ, дата)

на 20    /20    н.р.    (    ) «    »    20    р.  
(підпис, ПІБ, дата)  
(підпис, ПІБ, дата)

**КИЇВ – 2018**

Розробники Семенько Михайло Петрович, доктор фіз.-мат. наук, професор,  
професор кафедри фізики металів

*(вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)*

**«ЗАТВЕРДЖЕНО»**

Зав. кафедри фізики металів

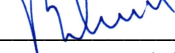
  
\_\_\_\_\_  
(підпис)

(Макара В.А.)  
(прізвище та ініціали)

Протокол від «16» \_\_03\_\_ 2018 р. за № 9

Схвалено науково - методичною комісією фізичного факультету

Протокол від «\_16\_» \_\_04\_\_ 2018 року № 12

Голова науково-методичної комісії  (Зеленський С.Є.)  
\_\_\_\_\_  
(підпис) (прізвище та ініціали)

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** – розглянути особливості дифракції на структурах з різним типом неупорядкування та застосування дифракційних методів для експериментального визначення основних параметрів таких структур

### 2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:

1. Знати кінематичну теорію розсіювання рентгенівських променів, загальні закономірності кристалічної будови тіл, Фур'є-аналіз.
2. Вміти аналізувати та обробляти дифракційні спектри від кристалів, визначати тип кристалічної структури за дифракційними спектрами, аналізувати результати Фур'є-перетворень;
3. Володіти елементарними навичками математичних перетворень, побудови алгоритмів, методами апроксимації та методами обробки експериментальних результатів; вільно володіти загально вживаними термінами конденсованого стану: кристалічна структура, ближній та дальній порядок, пружне та непружне поглинання, дифракція, структурний тип, координаційне число, розмірні ефекти тощо.

### 3. Анотація навчальної дисципліни / референс:

Задачею курсу є ознайомлення з основними типами неупорядкування в конденсованому стані та провести систематичний розгляд дифракції рентгенівських променів на неупорядкованих структурах з різним типом впорядкування та одержати практичні навички застосування дифракційних методів для дослідження неупорядкованих структур.

**4. Завдання (навчальні цілі)** – оволодіння методами і принципами обробки експериментальних результатів по дифракції на різних типах неупорядкування, що є необхідними для вільного ознайомлення з науковою літературою, використання сучасних методів обробки експериментальних результатів та при проведенні наукових досліджень.

Згідно вимог проекту Стандарту вищої освіти України (третій рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 104 «Фізика та астрономія», ОНП «Фізика та астрономія» дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних **компетентностей**:

Інтегральних:

Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної та/або дослідницько-інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики.

Загальних:

- Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК 1).
- Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК 2)
- Вміння виявляти, ставити та вирішувати проблеми (ЗК 4).
- Здатність працювати в міжнародному контексті (ЗК 6).
- Здатність працювати автономно та в команді (ЗК 7).
- Здатність розробляти та управляти проектами (ЗК 8).
- Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт (ЗК 10).
- Визначеність і наполегливість щодо поставлених завдань і взятих обов'язків (ЗК 11).
- Здатність діяти соціально відповідально та свідомо, нести повну відповідальність за самостійно виконану роботу (ЗК 12).

Фахових:

- Здатність застосовувати сучасні експериментальні методи дослідження та діагностики низькорозмірних систем, володіння принципами структурної побудови низькорозмірних систем (ФК6).
- Здатність застосовувати методи теорії взаємодії електромагнітних хвиль на динамічних періодичних структурах речовини (ФК15).
- Здатність до пошуку, обробки та аналізу інформації, розробка і впровадження інформаційних систем, використання сучасних програмних пакетів для розрахунку електронної та атомної структури матеріалів (ФК16).
- Здатність застосовувати знання дифракційних методів для дослідження неупорядкованих структур (ФК17).

**5. Результати навчання за дисципліною:** (описуються з детальною достовірністю для розробки заходів оцінювання)

<i>Результат навчання</i> (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)		<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
Код	Результат навчання			
1.1.	Знати основні типи неупорядкування та неупорядкованих матеріалів та кількісні параметри, що використовуються для опису неупорядкованості (впорядкування) для їх конкретних типів	<i>Лекції</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>Опитування в процесі лекції. Модульна контрольна робота, іспит</i>	15
1.2.	Знати особливості взаємодії рентгенівських променів з атомами та результат дифракції розсіяних променів на упорядкованих та неупорядкованих структурах	<i>Лекції</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи. Модульна контрольна робота, іспит</i>	5
1.3.	Знати специфіку впливу різних типів неупорядкування на дифракційні картини рентгенівських променів	<i>Лекції,</i> <i>Практичні роботи</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>Опитування в процесі лекції результати практичних робіт. Модульна контрольна робота, іспит.</i>	20
1.4.	Знати особливості впливу розмірності, дефектності, спотвореності різних типів структур на форму дифракційних спектрів та форму профілю дифракційних максимумів	<i>Лекції</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, іспит</i>	20
1.5	Знати основні програмні пакети, що можуть бути використані для обробки дифракційних спектрів та аналізу профілю дифракційних максимумів	<i>Лекції</i> <i>Практичні роботи</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>Опитування в процесі лекції, результати практичних робіт</i>	5
2.1	Вміти підготовлювати об'єкти для дифракційних досліджень та проводити оцінку точності результатів дифракції	<i>Практичні роботи</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>результати практичних робіт</i>	5
2.2	Вміти проводити профільний аналіз дифракційних максимумів та розділяти геометричні (приладові) та фізичні фактори різних дифракційних профілів	<i>Лекції,</i> <i>Практичні роботи</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, Звіти про виконання практичних робіт, іспит</i>	10
2.3	Вміти визначати різні параметри структури та аналізувати особливості її неупорядкованості	<i>Лекції</i> <i>Самостійна робота</i>	<i>Опитування в процесі лекції. Модульна контрольна робота, іспит</i>	10
3.1	Письмово відображувати та презентувати результати своїх досліджень українською мовою	<i>Самостійна робота</i>	<i>Звіти про виконання практичних робіт</i>	5
4.1	Самостійно освоювати та застосовувати різні пакетні програми для дифракційних досліджень	<i>Самостійна робота</i>	<i>Звіти про виконання практичних робіт</i>	5

\* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання**  
(необов'язково для вибіркових дисциплін)

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни										
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	2.1	2.2	2.3	3.1	4.1	
ПРН 1.1. Знати основи методології та організації наукових досліджень.	+					+					
ПРН 1.2. Знати основи теорії твердого тіла та процесів взаємодії електромагнітного випромінювання з молекулами та кристалами.	+	+									
ПРН 1.6. Знати принципи побудови низькорозмірних систем, сучасні експериментальні методи дослідження та діагностики низькорозмірних систем.	+	+		+							
ПРН 1.7. Знати теоретичні методи опису процесів розсіювання рентгенівських променів та нейтронів низькорозмірними системами.		+	+	+			+				
ПРН 1.12. Знати програмні пакети для розрахунку електронної та атомної структури матеріалів.					+		+	+			
ПРН.1.13. Знати дифракційні методи для дослідження неупорядкованих структур.		+	+	+			+	+			
ПРН 2.4. Вміти формулювати фізичні принципи дифракції рентгенівських променів та нейтронів низькорозмірними системами; планувати та виконувати експеримент в галузі дослідження низькорозмірних систем		+	+	+		+	+				
ПРН 2.5. Вміти оцінювати точність основних експериментальних методів спостереження дифракції рентгенівських променів та нейтронів низькорозмірними та нанорозмірними системами.		+	+	+			+				
ПРН 2.9. Вміти оцінювати точність основних експериментальних методів спостереження дифракції рентгенівських променів.			+	+		+	+				
ПРН 2.11. Вміти обирати відповідні програмні пакети для наукових розрахунків.					+		+	+			
ПРН 4.3. Здійснювати процедуру встановлення цінності джерел наукової інформації шляхом порівняльного аналізу з іншими джерелами.	+				+				+	+	
ПРН.5.1. Знати ґрунтовні знання предметної області та розуміння професії;	+	+							+	+	

## 7. Схема формування оцінки.

### 7.1 Форми оцінювання студентів:

#### - семестрове оцінювання:

1. *Модульна контрольна робота* : РН 1.1-1.4, 2.3 - 30 балів / 10 балів

2. *Захист звітів практичних робіт* : РН 1.3,1.5,2.1,2.2,3.1,4.1 - 20 балів / 5 балів

3. *Захист реферату* : РН 1.2, 1.4, 2.2, 3.1, 4.1 - 10 балів / 5 балів

#### - підсумкове оцінювання: у формі іспиту

*Підсумкова оцінка з освітнього компонента в цілому, підсумковою формою контролю за яким встановлено іспит, визначається як сума оцінок (балів) за всіма успішно оціненими результатами навчання під час семестру (оцінки нижче мінімального порогового рівня до підсумкової оцінки не додаються) та оцінки, отриманої під час іспиту.*

*Формою проведення іспиту є написання письмової роботи з подальшою усною співбесідою. Результатами навчання, які оцінюються на іспиті, є РН 1.1-3.1. Максимальна кількість балів, яка може бути отримати здобувачем освіти під час іспиту, становить 40 балів за 100 бальною шкалою.*

*Перескладання семестрового контролю з метою покращення позитивної оцінки не допускається.*

#### - умови допуску до підсумкового іспиту:

*Обов'язковою умовою допуску до іспиту є відпрацювання всіх практичних робіт та написання модульної контрольної роботи. Здобувач освіти не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше ніж 20 балів.*

### 7.2. Організація оцінювання:

*Модульна контрольна робота проводяться по завершенні тематичних лекцій.*

*Захист звітів практичних робіт проводиться упродовж семестру.*

### 7.3 Шкала відповідності оцінок

<b>Відмінно / Excellent</b>	90-100
<b>Добре / Good</b>	75-89
<b>Задовільно / Satisfactory</b>	60-74
<b>Незадовільно / Fail</b>	0-59

**8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ**

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	Самостійна робота
1	<p><b>Topic 1.</b> The basis types of disordering and the typical disordered structures./ Основні типи неупорядкування та основні типи неупорядкованих структур.</p> <p>The general types of symmetry in structures. Point and space symmetry elements in crystals. The topological and chemical disordering. The disordering solid solutions and their statistical analysis. The nanocrystals and nanostructures. The quasi-crystals. The para-crystals. The amorphous solids. The high entropy alloys and oxides. Peculiarities influence of the disordering on physical properties./ Основні типи симетрії в структурах. Точкові та просторові елементи симетрії в кристалах. Топологічне та хімічне неупорядкування. Неупорядковані тверді розчини та їх статистичний аналіз. Нанокристали та наноструктури. Квазікристали. Паракристали. Аморфні тіла. Високоентропійні сплави та оксиди. Особливості впливу неупорядкування на фізичні властивості.</p> <p><b>i.w.s.</b> Study of the lecture materials./ Вивчення матеріалу лекцій.</p> <p>Ordering and disordering parameters for different types of the structures. / Параметри порядку та безладу в різних типах структур</p>	2		6
2	<p><b>Topic 2.</b> General features of x-ray diffraction./ Загальні особливості дифракції рентгенівських променів.</p> <p>X-ray scattering by the electron. The polarization factor. X-ray scattering by the atom. The atomic factor. Lorentz factor. The structural amplitude and structural factor for ordered structures. The thermal factor. The static Debay-Waller factor. Interpretation of occurrence of diffraction maxima under different conditions of obtaining diffraction patterns. Common peculiarities of the scattering and diffraction maxima occurrence during electron and neutron diffraction. / Розсіювання рентгенівських променів електроном. Поляризаційний множник. Розсіювання рентгенівським променів атомом. Атомний фактор. Фактор Лоренца. Структурна амплітуда та структурний фактор для упорядкованих структур. Температурний множник. Статичний фактор Дебая-Валлера. Інтерпретація виникнення дифракційних максимумів при різних умовах одержання дифракційних картин. Загальні особливості розсіювання та виникнення дифракційних максимумів при електронній та нейтронній дифракції.</p> <p><b>i.w.s.</b> Study of the lecture materials./ Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>The structural factor for different material types and phase analysis peculiarities. / Структурний фактор для різних типів матеріалів та закономірності фазового аналізу.</p>	2		14

3	<p><b>Topic 3.</b> Diffusive scattering of X-rays by periodic structures/ Дифузне розсіювання рентгенівських променів на періодичних структурах.</p> <p>Influence of the thermal atomic oscillations on the scattering intensity of the crystal. The thermal diffusive scattering. Diffusive scattering by the solid solutions. Parameter of the short range ordering. General features of diffuse scattering studies. / Вплив теплових коливань атомів на інтенсивність розсіювання кристалами. Теплове дифузне розсіювання. Дифузне розсіювання твердими розчинами. Параметр ближнього порядку. Загальні особливості дифракційних досліджень дифузного розсіювання.</p> <p><b>i.w.s.</b> Study of the lecture materials./ Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Statistical description of disordering in alloys. / Статистичний опис неупорядкування у сплавах.</p>	2	2	12
4	<p><b>Topic 4.</b> Diffraction from amorphous materials. / Дифракція від аморфних матеріалів.</p> <p>X-ray scattering intensity by simple (monatomic) liquids. The function of radial distribution of atoms and its analysis. Angular distribution of X-ray scattering intensity by multicomponent melts and amorphous alloys. The radial function and Fourier transformation. The partial function of radial distribution of atoms. The experimental methods for study of noncrystalline substance. The peculiarities of atomic structure of the amorphous metals. / Інтенсивність розсіювання рентгенівського випромінювання простими (одноатомними) рідинами. Функція радіального розподілу атомів та її аналіз. Кутовий розподіл інтенсивності розсіювання рентгенівського випромінювання багатоконпонентними розплавами та аморфними сплавами Радіальні функції розподілу атомів та методи перетворення Фур'є. Парціальні функції розподілу атомів. Експериментальні методи дослідження структури некристалічних речовин. Особливості атомної структури аморфних металів.</p> <p><b>i.w.s.</b> Study of the lecture materials./ Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Determination of parameters of amorphous alloys and liquids by diffraction spectra. / Визначення параметрів аморфних сплавів та рідин за дифракційними спектрами.</p>	2		14



5	<p><b>Topic 5.</b> Application of diffraction methods for determining the size of structures and stress state./ Застосування дифракційних методів для визначення розмірів структур та напруженого стану.</p> <p>Diffraction maximum width. Debae-Sherrer equation. The classification of strains. Determination of macro stresses. The geometrical and physical components of the diffraction maximum width. The convolution equation as a result of the influence of various factors on the shape of the diffraction profile. The separation of the physical component in diffraction maxima width by the Stocks method. The approximation method. The method of moments. The Fourier analysis. Application of Fourier analysis to split doublet. Application of the Fourier analysis to separately determine dispersion dispersity and microstrains. / Ширина дифракційного максимуму. Рівняння Дебая-Шеррера. Класифікація напружень. Визначення макронапружень. Геометрична та фізична компоненти ширини дифракційного максимуму. Рівняння згортки, як результат впливу різних факторів на форму дифракційного профілю. Виділення фізичної компоненти ширини дифракційної лінії методом Стокса.. Метод апроксимації. Метод моментів. Фур'є-аналіз. Застосування Фур'є аналізу для розділення дублету. Застосування Фур'є-аналізу для роздільного визначення дисперсності та мікронапружень.</p> <p><b>i.w.s.</b> Study of the lecture materials./ Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>The convolution and peculiarities of the convolution function determination. / Згортка та особливості знаходження функцій згортки.</p>	3	2	16
6	<p><b>Topic 6.</b> The small angle X-ray scattering. / Малокутове розсіювання рентгенівських променів.</p> <p>The relation between the size and form of the reciprocal lattice point and the crystal size and form. Scattering features near zero lattice point. The amplitude of the wave at scattering by a zero lattice point. The amplitude of wave scattering by small particle. Scattering intensity. Determine the size of an object by the results of small-angle scattering. Features of obtaining small-angle scattering. / Зв'язок розміру та вузла оберненої ґратки з формою та розміром кристалів. Особливості розсіювання біля нульового вузла. Амплітуда хвилі при розсіюванні нульовим вузлом. Амплітуда хвилі при розсіюванні малою частинкою. Інтенсивність розсіювання. Визначення розміру об'єкту за результатами малокутового розсіювання. Особливості одержання малокутового розсіювання.</p> <p><b>i.w.s.</b> Study of the lecture materials./ Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Determination of particle size distribution in the method of small-angle scattering / Визначення розподілу частинок за розміром в методі малокутового розсіювання</p>	2		14

7	<p><b>Topic 7.</b> Features of electron diffraction and its application for the study of disorder. / Особливості дифракції електронів та її застосування для вивчення неупорядкування.</p> <p>Atomic electron scattering amplitude and its angular dependence. Intensity of diffraction maxima. Building Evalda for electronography. Indexing of point and ring electron diffraction partent. Microdiffraction of electrons. Slow electron diffraction. Areas of application of electronography. Methodological features of conducting an electronographic experiment. Sampling. / Атомна амплітуда розсіювання електронів та її кутова залежність. Інтенсивність дифракційних максимумів. Побудова Евальда для електронографії. Індексуння точкових та кільцевих електронogram. Мікродифракція електронів. Дифракція повільних електронів. Области застосування електронографії. Методичні особливості проведення електронографічного експерименту. Приготування зразків.</p> <p><b>i.w.s.</b> Study of the lecture materials./ Вивчення матеріалу лекції.</p> <p>Features of interpretation of electrons, neutrons and formation of electron microscopic images.</p>	1		12
	<i>Підсумкова модульна контрольна робота</i>	1		
	<b>ВСЬОГО</b>	<b>18</b>	<b>4</b>	<b>98</b>

Примітка: слід зазначити теми, винесені на самостійне вивчення

**Загальний обсяг 120 год.<sup>1</sup>**, в тому числі:

Лекцій – **18 год.**

Семінари – **0 год.**

Практичні заняття – **4 год.**

Лабораторні заняття – **0 год.**

Тренінги – **0 год.**

Консультації - **2 год.**

Самостійна робота - **98 год.**

<sup>1</sup> Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.

## 9.РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА<sup>2</sup>:

### **Основна:**

∴

1. C. Suryanarayana, M. Grant Norton. X-ray diffraction. A. Practical approach. Springer Science+Business Media, LLC. – 1998.
2. Yoshio Waseda, Eiichiro Matsubara, Kozo Shinoda. X-Ray Diffraction Crystallography. Introduction, Examples and Solved Problems. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2011.
3. J. M. ZIMAN, MODELS OF DISORDER. The theoretical physics of homogeneously disordered systems. Cambridge University Press Cambridge London- New York- Melbourne. 1979.
4. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. Киев Наукова думка, 1976
5. Русаков А.А. Рентгенография металлов. М.: Атомиздат.-1977.
6. Уманский Я.С. и др. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Металлургия.- 1982.
7. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М.: ИЛ.- 1950.
8. Дифракционные и микроскопические методы в материаловедении. Под ред. С.Амелинка, Р.Геверса и Дж.Ван Ландё. М.: Металлургия.-1984.
9. Захаренко М.І., Семенько М.П., „Методи структурного аналізу” (методичні вказівки до лабораторних робіт з курсу „Дифракційні методи дослідження конденсованого стану” Київ.- 2012.
10. Семенько М.П. „Структурна кристаллографія” (вибрані лекції по кристаллографії) для студентів фізичного факультету.// Київ. – 2019 р. – 63 с.
11. Металлические стекла. II. Атомная структура и динамика, Электронная структура, магнитные свойства. Под ред. Г.Бека и Г.Гюнтеродта, М.: Мир. – 1966.
12. HOSEMANN, R. & BAGCHI, S. N. Direct Analysis of Diffraction by Matter. (1962). Amsterdam: North-Holland Publishing Co.
13. Zallen, Richard. The physics of amorphous solids. // A Wiley-Interscience publication.- 1998

### **Додаткова:**

1. Горелик С.С. и др. Рентгенографический и электроннооптический анализ. М.: Металлургия.- 1970.
2. Уманский Я.С., Золина З.К. Сборник задач по рентгеноструктурному анализу. М.: изд-во МГУ.- 1975.
3. Петренко П.В. Дифракційні методи структурного аналізу. Кінематичне наближення. К.:ВЦП «Київський університет». – 2005.
4. Иверонова В.И., Ревкевич Г.П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. М.: Изд-во МГУ, 1972.

---

<sup>2</sup> В тому числі Інтернет ресурси