

**Учебный план курса «Рентгеновская дифракция»
(читается по средам, 15:10 НИЦПВ)**

№ лекции	Дата	Название/Тезисы
1	28.09	Симметрия кристаллов.
		Кристалл как система с периодической симметрией. Элементарная ячейка. Примитивная ячейка. Сингонии, решетки Браве. Открытые и закрытые элементы симметрии. Пространственные группы. Матричное описание элементов симметрии: трехмерные и четырехмерные матрицы. Описание кристаллической структуры.
2	05.10	Рентгеновское излучение и его взаимодействие с веществом.
		Взаимодействие рентгеновского излучения (РИ) с веществом. Томсоновское рассеяние, комптоновское рассеяние, фотоэффект. Когерентное упругое рассеяние – дифракция РИ. Особенности дифракции полихроматического излучения, выбор длины волны. Принцип действия β -фильтров.
3	12.10	Основы кинематической теории дифракции.
		Фурье-образ периодической функции. Обратное пространство. Рассеяние на системе атомов. Закон Брегга в векторной и скалярной форме. Сфера Эвальда. Форм-факторы атомов, параметры атомного смещения, заселенность. Структурная амплитуда.
4	19.10	Дифракция на реальных системах. Теоретическая дифрактограмма.
		Поляризационный фактор. Дифракция РИ на монокристаллической и поликристаллической пробах. Лоренц- и геометрический факторы. Абсорбция РИ в образце, абсорбционный фактор. Текстура, экстинкция. Понятие о профильной функции рефлекса.
5	26.10	Экспериментальная техника дифракционного эксперимента.
		Источники и детекторы РИ. Понятие о геометрии съемки. Выбор оптимальной геометрии. Рентгеновская оптика. Планирование эксперимента: выбор излучения, параметров съемки. Работа в нестандартных условиях: высокие/низкие температуры и т.п. Ошибки в дифракционном эксперименте.
6	02.11	Обработка результатов дифракционного эксперимента. Профильный анализ. Качественный рентгенофазовый анализ. Базы данных ICDD.
		Профильная функция. Фон дифрактограммы. Профильный анализ как вариационная задача. Результаты профильного анализа. Порошковая дифрактограмма смеси фаз. Качественный рентгенофазовый анализ. Базы данных ICDD. Порядок проведения качественного РФА.
7	09.11	Индицирование порошковых дифрактограмм, решение кристаллических структур.
		Взаимосвязь параметров элементарной ячейки и положения рефлекса. Ручное и автоматическое индицирование. Программы для автоматического индицирования. Метод гомологии. Методы решения кристаллических структур. Подбор изоструктурного соединения. Функция Паттерсона. Прямые методы в решении кристаллических структур. Методы Монте-Карло. Метод Charge flipping. Фурье-синтез. Особенности работы с порошковыми данными. Методы Паули и ЛеБея.
8	16.11	Лекционная контрольная №1.
9	23.11	Уточнение кристаллических структур. Метод Ритвельда. Количественный рентгенофазовый анализ.
		Математические основы методы Ритвельда. Пространство вариационных переменных. Порядок проведения уточнения. Показатели качества уточнения. Текстурирование образцов. Практически аспекты работы с программными пакетами (на примере Jana). Математические основы количественного РФА. Дифракция на многофазной смеси. Метод внутреннего стандарта, метод добавок, метод корундовых чисел (метод внешнего стандарта). Метод Ритвельда как нестандартный рентгенофазовый анализ. Микроабсорбция.

10	30.11	<p style="text-align: center;">Текстура поликристаллических объектов.</p> <p>Понятие о текстурировании. Причины текстурирования. Одноосные модели текстуры, выбор оси текстурирования. Учет текстуры в полнопрофильном уточнении. Прямые и обратные полюсные фигуры. Расчет ODF, учет функции дефокуса. Понятие об остаточных напряжениях, методы исследования остаточных напряжений.</p>
11	07.12	<p style="text-align: center;">Дифракция рентгеновского излучения на нанобъектах.</p> <p>Дифракция рентгеновского излучения на конечной системе с распределенной электронной плотностью. Понятие области когерентного рассеяния. Интерференционная функция Лауэ. Формула Шеррера, метод Уоррена-Ауэрбаха. Микронапряжения в твердом теле. Угловая зависимость вклада образца в полуширину рефлекса: изотропный и анизотропный случаи. Когерентное рассеяние РИ на протяженных дефектах. Метод WPPM.</p>
12	14.12	<p style="text-align: center;">Малоугловое рассеяние РИ. Рентгеновская рефлектометрия.</p> <p>Дифракция на тонких пленках. Геометрия скользящего пучка. Рентгеновская рефлектометрия. Оценка параметров микроструктуры образца по данным порошковой дифракции (размер ОКР, концентрация микронапряжений). Сочетание порошковой рентгеновской дифракции с другими дифракционными методами (дифракция электронов, дифракция нейтронов).</p>
13	21.12	<p style="text-align: center;">Лекционная контрольная №2.</p>