

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
«ХАРКІВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ

до виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання)

з навчальної дисципліни «Спеціальні задачі та методи
рентгеноструктурного аналізу»

для студентів денної та заочної форм навчання
за спеціальністю G8 «Матеріалознавство»

Затверджено
редакційно-видавничою
радою університету,
протокол № 1 від 19.02.2026 р.

Харків
НТУ «ХПІ»
2026

Методичні вказівки до виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання) з навчальної дисципліни «Спеціальні задачі та методи рентгеноструктурного аналізу» для студентів денної та заочної форм навчання за спеціальністю G8 «Матеріалознавство» / Колектив авторів кафедри «Матеріалознавство» за загальною редакцією В. В. Білозерова. – Харків : НТУ «ХПІ», 2026. – 36 с.

Укладачі: В. В. В. Білозеров
В. В. Субботіна
О. В. Субботін
Г. А. Федоренко

Рецензент: В. В. Дмитрик

Кафедра «Матеріалознавство»

ВСТУП

Навчальна дисципліна «Спеціальні задачі та методи рентгеноструктурного аналізу» належить до циклу навчальних дисциплін професійної підготовки за освітньо-науковою програмою «Прикладне матеріалознавство та новітні технології» другого (магістерського) рівня вищої освіти за спеціальністю G8 «Матеріалознавство».

В системі підготовки фахівців у вищих навчальних закладах актуальним є індивідуально-орієнтований підхід в організації навчання студентів, що визначено нормативно-правовими актами Міністерства освіти і науки. За цих умов індивідуальне завдання (розрахункове завдання), як одна із форм індивідуального завдання, є складовою програми підготовки з навчальної дисципліни «Спеціальні задачі та методи рентгеноструктурного аналізу». Метою виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання) є підготовка студентами аналітичних та узагальнюючих матеріалів. При підготовці індивідуального завдання (розрахункового завдання) студенти повинні отримати навички опрацювання літературних джерел, складання плану індивідуального завдання (розрахункового завдання) та розкриття теми з використанням нормативного та практичного матеріалу, особистого досвіду тощо. Дана форма письмової роботи базується на реферуванні окремих питань за обраною тематикою з літературних джерел, а також можливому виконанні деяких розрахунків, якщо це необхідно для розв'язання певних завдань. Вона призначена для поточного або підсумкового закріплення навчального матеріалу та контролювання знань і навичок, набутих студентами в процесі навчання. Виклад матеріалу в розрахунковому завданні повинно мати чітку логічну послідовність згідно з обраною темою, власне аналізу та узагальнення інформації, отриманої з досліджених літературних джерел, творчий підхід до теми.

Індивідуальне завдання (розрахункове завдання) широко використовується в навчальному процесі як спосіб оцінювання не тільки знань студента, а ще

і його вміння опрацьовувати та аналізувати джерела інформації.

Методичні вказівки до виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання) з навчальної дисципліни «Спеціальні задачі та методи рентгеноструктурного аналізу» призначені для ознайомлення студентів з основними вимогами до робіт такого типу, правилами оформлення та основними критеріями оцінювання.

Виконання студентом індивідуального завдання (розрахункового завдання) стимулює творчі здібності та дозволяє повністю розкрити його потенціал до самостійної роботи. Під час написання індивідуального завдання (розрахункового завдання) відбувається узагальнення та структурування знань за його тематикою, тому вибір тематики індивідуального завдання (розрахункового завдання) слід проводити з урахуванням подальшої роботи студента в даному напрямку.

1. ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ

Згідно з освітньо-науковою програмою «Прикладне матеріалознавство та новітні технології» другого (магістерського) рівня вищої освіти за спеціальністю G8 «Матеріалознавство» індивідуальне завдання (розрахункове завдання) з навчальної дисципліни «Спеціальні задачі та методи рентгеноструктурного аналізу» є обов'язковою формою самостійної позааудиторної роботи студентів денної та заочної форм навчання.

Мета індивідуального завдання (або розрахункового завдання) при вивченні навчальної дисципліни «**Спеціальні задачі та методи рентгеноструктурного аналізу**» полягає в тому, щоб закріпити теоретичні знання та розвинути практичні навички, пов'язані з аналізом кристалічних структур за допомогою методів рентгеноструктурного аналізу.

Вимоги до студентів при виконанні індивідуального завдання (розрахункового завдання) такі:

– розуміння теоретичних основ: студенти поглиблюють знання про фізичні принципи дифракції рентгенівських променів, будову кристалів, симетрію кристалічних решіток та взаємодію рентгенівського випромінювання з матеріалами;

– практичне застосування методів: виконання завдання допомагає навчитися застосовувати спеціальні методи аналізу, такі як метод Лауе, методи порошкового і монокристалічного аналізу, а також інтерпретувати експериментальні дані;

– розвиток аналітичного мислення: завдання сприяє розвитку навичок обробки дифракційних даних, розрахунків параметрів кристалічної решітки, аналізу дефектів кристалічної структури та інших аспектів;

– підготовка до наукової діяльності: Завдяки індивідуальним завданням студенти отримують досвід вирішення специфічних задач, які можуть виникати у науковій та інженерній практиці, особливо в матеріалознавстві, хімії чи фізиці

– самостійна робота: завдання розвиває здатність самостійно планувати, виконувати обчислення та робити висновки на основі аналізу структурних даних.

Індивідуальне завдання (розрахункове завдання) є заключним етапом засвоєння навчальної дисципліни «Спеціальні задачі та методи рентгеноструктурного аналізу».

Методики аналізу будови кристалів, симетрії кристалічних решіток та вза-

ємодії рентгенівського випромінювання з матеріалами, базуються на теоретичних відомостях та навичках, набутих студентами під час вивчення навчальної дисципліни «Спеціальні задачі та методи рентгеноструктурного аналізу». Цим забезпечується зв'язок індивідуального завдання (розрахункового завдання) з іншими навчальними дисциплінами за навчальним планом кафедри, що пов'язано з вивченням процесів утворення структур двокомпонентних сплавів.

Виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання), в свою чергу, формує у студентів навички, необхідні для подальшого вирішення широкого кола інженерних питань.

Мета методичних вказівок – навчити самостійно користуватись технічною, у тому числі довідковою, літературою розвинути навички до самостійної роботи та наукового дослідження. Методичні вказівки призначені для студентів спеціальності G8 «Матеріалознавство» другого (магістерського) рівня вищої освіти денної та заочної форм навчання закладів вищої освіти.

Кожен студент обирає варіант індивідуального завдання для виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання). Номер варіанта відповідає номеру студенти у списку групи.

Індивідуальне завдання (розрахункове завдання) передбачає вирішення завдань по всьому курсу, що вивчається (взаємодія рентгенівського випромінювання з речовиною, методи рентгеноструктурного аналізу, використання методів рентгеноструктурного аналізу для дослідження металів і сплавів).

2. ПРИКЛАД ТИПОВОГО ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (РОЗРАХУНКОВОГО ЗАВДАННЯ)

1. Розрахувати інтенсивність дифракційних відображень для певного матеріалу.
2. Визначити період кристалічної ґратки.
3. Визначити коефіцієнт теплового розширення.
4. Визначити величину макронапружень.
5. Побудувати теоретичну текстурограму.
6. Визначити розміри блоків і рівень мікродеформації методом апроксимації.

3. ПРИКЛАД ВИКОНАННЯ ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (РОЗРАХУНКОВОГО ЗАВДАННЯ) (наприклад, Cr)

Вступ – надати інформацію щодо матеріалу, згідно якого будуть проведені розрахунки інтенсивності дифракційних відображень, проведено прецизійне визначення періоду кристалічної ґратки, визначено коефіцієнт термічного розширення, величину макронапружень.

1. Розрахунок інтенсивності перших п'яти дифракційних відображень Cr у випромінюваннях λ -Cr і λ -Mo

Параметр ґратки Cr $a = 2,884 \text{ \AA}$.

Просторова група Im3m.

Структурний тип A2.

Інтенсивність дифракційних відображень визначається співвідношенням:

$$I_{hkl} = \frac{(1 + \cos^2 2\theta)}{\sin^2 \theta \cdot 1/\cos \theta} \cdot |F_{hkl}|^2 \cdot P \cdot A(\theta), \quad (1.1)$$

де $\frac{(1 + \cos^2 2\theta)}{\sin^2 \theta \cdot 1/\cos \theta}$ – кутовий множник; $|F_{hkl}|^2$ – структурний множник, показує, у скільки разів інтенсивність відбитих променів більша, у разі складної ґратки порівняно з примітивною; P - фактор повторюваності; A(θ) - множник поглинання.

1.1.1 Структурний множник

Структуру Cr описує ОЦК ґратка і базис $[[0 \ 0 \ 0 \ 0]]$, $[[1/2 \ 1/2 \ 1/2 \ 0]]$.

У цьому разі вираз для структурної амплітуди:

$$F = \sum_J^N f_j e^{-2\pi i(hu_j + kv_j + lw_j)} \quad (1.2)$$

Містить два члени ($N = 2$; $[[0 \ 0 \ 0 \ 0]]$, $[[1/2 \ 1/2 \ 1/2 \ 0]]$).

$$|F| = f [1 + 1^{\pi i(h+k+l)}] = f [1 + \cos \pi (h + k + l) + I \cdot \sin \pi (h + k + l)];$$

$$|F| = f [1 + \cos \pi (h + k + l)];$$

$$|F| = 2f, \text{ якщо } h + k + l = 2n;$$

$$|F| = 0, \text{ якщо } h + k + l = 2n + 1.$$

Отже, під час розсіювання рентгенівських променів для ОЦК ґратки будуть присутні такі відбиття, для яких сума індексів h, k, l дорівнює парному числу.

У разі ОЦК ґратки інтенсивність відбиття буде в 4 рази сильнішою, ніж у примітивній.

Згідно з квадратичною формулою:

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2(h^2 + k^2 + l^2)} \quad (1.3)$$

положення дифракційних ліній збільшуватиметься відповідно до збільшення суми квадратів індексів.

Індекси віддзеркалень у порядку збільшення суми їхніх квадратів наведено в таблиці 1.1.

Таблиця 1.1 – Індекси відображень

$h^2 + k^2 + l^2$	hkl
2	110
4	200
6	211
8	220
10	310

Т. ч. перші п'ять відображень мають індекси (110), (200), (211), (220), (310). Розрахунок кутів відбиття наведено в таблиці 1.2.

Міжплощинну відстань (d) знаходимо за формулою:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2)}{a^2} \quad (1.4)$$

Таблиця 1.2 – Розрахунок кутів відбиття

<i>hkl</i>	$\sum h_i^2$	<i>d</i> , Å	θ°	
			λ -Cr	λ -Mo
(110)	2	2,052	33,933	9,97
(200)	4	1,436	52,909	14,327
(211)	6	1,177	76,706	17,572
(220)	8	1,014		20,514
(310)	10	0,909		23,012

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (1.5)$$

де $a = 2,884 \text{ \AA}$.

Кути відбиття визначаємо за рівнянням Вульфа-Брегга

Звідси структурний множник дорівнює:

$$|F|^2 = 4f^2$$

$f = f(\sin\theta/\lambda,)$ - атомна амплітуда

Атомна амплітуда визначається з графіка, побудованого за довідковими даними (рис. 3.1) (довідник Міркіна «Рентгеноструктурний аналіз полікристалів і структурного множника»).

1.1.2. Кутовий множник

Кутовий множник визначаємо за довідником Гореліка «Рентгенографічний аналіз» [1].

1.1.3. Фактор повторюваності

P – фактор повторюваності беремо з довідника Міркіна «Довідник з рентгеноструктурного аналізу полікристалів».

Для ОЦК ґратки фактор повторюваності (P) дорівнює:

$$P_{110} = 12; P_{200} = 6; P_{211} = 24; P_{220} = 12; P_{310} = 24.$$

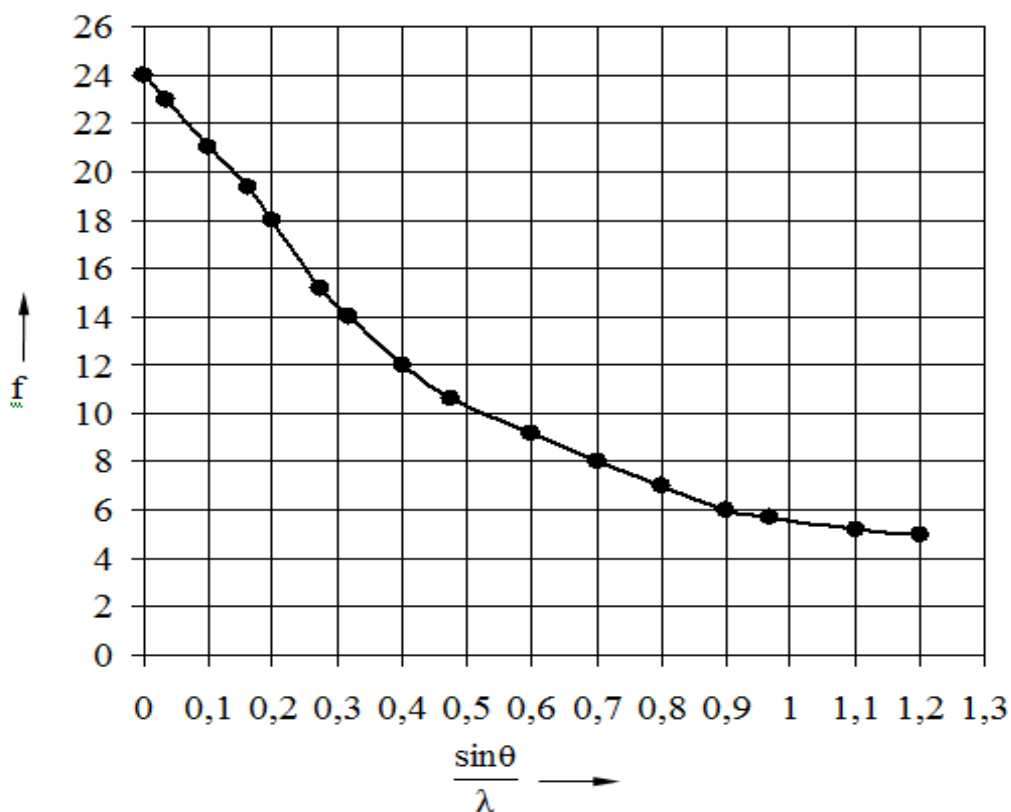


Рисунок 1.1 – Графік залежності атомної амплітуди (f) від $\sin\theta/\lambda$

Таблиця 1.3 – Значення атомної амплітуди

$\sin\theta/\lambda$		f		$ F ^2$	
λ -Cr	λ -Mo	λ -Cr	λ -Mo	λ -Cr	λ -Mo
0,243667	0,243660	16,2014	16,2015	1049,9452	1049,9673
0,348191	0,348190	13,96160	13,96162	779,7058	779,7074
0,424808	0,424804	12,5189	12,5190	626,9011	626,9095
	0,49309		11,3593		516,1438
	0,55006		10,4745		438,8662

Фактор повторюваності будь-якого відображення чисельно дорівнює кількості сімейств площин, що належать даній формі, (кількість рівнозначних площин). Знаходимо інтенсивність дифракційних відображень для λ -Cr:

$$I_{110} = 55650,0354;$$

$$I_{200} = 13096,7183;$$

$$I_{211} = 124328,029.$$

Знаходимо інтенсивність дифракційних відображень для λ -Mo:

$$I_{110} = 803596,673;$$

$$I_{200} = 139571,679;$$

$$I_{211} = 288931,053;$$

$$I_{220} = 84496,0434;$$

$$I_{310} = 110982,942$$

Таблиця 1.4 – Значення кутового множника

hkl	$d, \text{Å}$	$\frac{(1 + \cos^2 2\theta)}{\sin^2 \theta \cdot \cos \theta}$	
		λ -Cr	λ -Mo
(110)	2,052	4,4169	63,7795
(200)	1,436	2,7995	29,8342
(211)	1,177	8,2634	19,2034
(220)	1,014		13,6422
(310)	0,909		10,5369

Таблиця 1.5 – Відношення I/I_0

hkl	I, від.од.		I/I ₀ , %	
	λ-Cr	λ-Mo	λ-Cr	λ-Mo
110	55650,0354	803596,673	45	100
200	13096,7183	139571,679	11	17
211	124328,029	288931,053	100	36
200		84496,0434		11
310		110982,942		14

2. Прецизійне визначення періоду ґратки Cr

Підібрати випромінювання найбільш доцільне для прецизійного визначення періоду ґратки Cr.

Прецизійне вимірювання параметра ґратки доцільно проводити у випромінюванні, за якого спостерігається найбільший кут відбиття, оскільки зі збільшенням кута відбиття θ зменшується похибка визначення параметра комірки:

$$\frac{\Delta a}{a} = -\text{ctg}\theta \text{tg} \quad (2.1)$$

Кубічна ґратка характеризується одним параметром, тому для його визначення можна скористатися будь-яким відображенням з будь-якими індексами.

Квадратична формула для кубічної системи має вигляд:

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2(h^2 + k^2 + l^2)} \quad (2.2)$$

Для визначення індексів відбиття з гранично великим кутом θ , вважаємо у співвідношенні (1.8) $\sin\theta = 1$ і беремо найближче менше значення суми квадратів індексів із цілочисельними значеннями h, k, l , які задовольняють умову, що накладається законом згасання.

Згідно з вибором матеріалу анода можна використовувати такі випромінювання: Cr. Результат вибору матеріалу анода наведено в таблиці 2.1

Таблиця 2.1 – Результати вибору матеріалу анода

Випромінювання		$\lambda, \text{Å}$	$\sum h_{i\max}^2$	hkl	$d, \text{Å}$	θ°
Cr	$\lambda_{\text{к}\alpha}$	2,29	6	211	1,1776	76.58
	$\lambda_{\text{к}\beta}$	2,08	6	211	1,1776	62.27

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2} \cdot \sum h_i^2 \quad (2.3)$$

$$l = \frac{\lambda^2}{4a^2} \cdot \sum h_i^2 \quad (2.4)$$

$$\sum h_i^2 = \frac{4a^2}{\lambda^2} \quad (2.5)$$

Міжплощинну відстань знаходимо за формулою:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (2.6)$$

$$a = 2,884 \text{ Å.}$$

Кути відображення визначаємо за формулою Вульфа-Брегга:

$$2d \sin \theta = \lambda \quad (2.7)$$

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2d} \quad (2.8)$$

Аналіз таблиці показує, що умова вибору матеріалу анода забезпечує випромінювання, що дає тах кут відбиття. У випромінюванні $\lambda_{\text{к}\alpha}$ -Cr на куті $\theta = 76,58^\circ$ є дифракційна лінія (211).

За похибки у визначенні положення $\Delta\theta = 0,01$, відносна похибка знаходиться за формулою:

$$\Delta a = a \cdot \text{ctg}\theta \cdot \Delta\theta \quad (2.9)$$

$$\Delta a = 2,884 \cdot \text{ctg} 76,58 \cdot 0,01/4,19 \cdot 57,3 = 1,2 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}$$

3 Побудування теоретичної текстурограму для дроту з Сг з аксіальною текстурою <111>

Під час побудови текстурограми обмежимося першими п'ятьма дебаєвськими кільцями. Текстурограму отримано в жорсткому випромінюванні К α -Мо на просвіт.

Відстань від зразка до рентгенівської плівки 40 мм.

Скористаємося формулами та знайдемо θ і r .

$$\sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a^2(h^2 + k^2 + l^2)},$$

$$r = D \cdot \text{tg}2\theta \quad (3.1)$$

де r – радіус кілець; D – відстань від зразка до рентгенівської плівки. Визначаємо розташування кілець на плівці. Для свинцю першими п'ятьма лініями будуть (110), (200), (211), (220), (310).

У таблиці 3.1 наведено значення θ і r .

Таблиця 3.1 – Значення кутів θ і радіусів кілець r для перших п'яти ліній

hkl	110	200	211	220	310
$\theta,^\circ$	7,90	11,21	13,78	15,96	17,94
$r, \text{ мм}$	11,3	16,5	20,8	24,9	28,9

На рис. 3.1 показано п'ять кілець, з радіусом кілець r .

Кути між нормою площини, що відбиває, і віссю текстури:

$$\cos\rho = \frac{(u_1u_2 + v_1v_2 + w_1w_2)}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + w_1^2}} \cdot \sqrt{u_2^2 + v_2^2 + w_2^2} \quad (3.2)$$

Знаючи кути θ і ρ , можна визначити δ , яке відраховується на плівку від напрямку паралельного осі дроту.

$$\cos\rho = \cos\theta \cdot \cos\delta \quad (3.3)$$

$$\cos\delta = \frac{\cos\rho}{\cos\theta} \quad (3.4)$$

Значення кутів ρ і δ для текстури (111) наведено в таблиці 3.2.

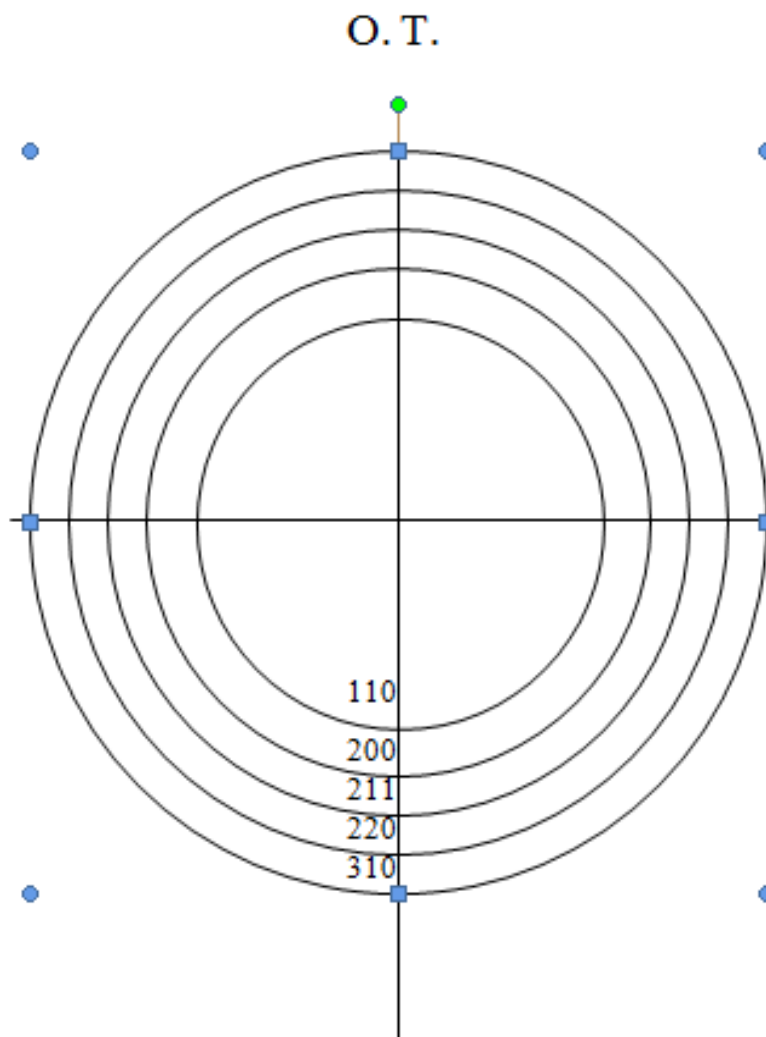


Рисунок 3.1 – Текстурограма для дроту з хрому з аксіальною текстурою $\langle 111 \rangle$

Таблиця 3.2 – Значення кутів θ , ρ і δ для перших п'яти ліній

hkl	$\theta,^\circ$	ρ	δ
110	7,90	35,27	34,5
		90	90
200	11,21	54,73	54
211	13,78	19,47	14
		61,87	61
		90	90
220	15,26	35,27	32
		90	90
310	17,94	43,10	40
		68,58	67,5

4. Визначення величини макронапружень

Рентгенівські методи визначень напружень засновані на вимірюванні деформації кристалічної ґратки за зміщенням дифракційних ліній.

$$\varepsilon = \frac{(d - d_0)}{d_0} \quad (4.1)$$

Коли відомі точні значення ґратки в ненапруженому стані, а отже, і значення d_0 , то за однією серією похилих зйомок за умови $\varphi = \text{const}$ знаходять не тільки компоненти напружень σ_φ , а й алгебраїчну суму двох головних напружень $\sigma_1 + \sigma_2$.

$$\varepsilon_{\varphi\psi} = \frac{1+\mu}{E} \sigma_x \sin^2 \psi + \varepsilon_\perp \quad (4.2)$$

де φ – напрямок, у якому хочемо визначити напруження; ψ – кут між нормою до зразка і до площин, що відбивають; μ – коефіцієнт Пуассона: приймаємо рівним 0,3; E – модуль нормальної пружності, $E = 23,5 \cdot 10^4$ МПа.

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{-\mu}{E}(\sigma_1 + \sigma_2) = \frac{d_{\perp} - d_0}{d_0} \quad (4.3)$$

Для того щоб оцінити залишкові макронапруження, необхідно провести прецизійну зйомку для точного визначення періоду ґратки. Діємо за такою схемою: вибираємо випромінювання, проводимо зйомку і знімаємо дифракційні лінії за кутів $\psi = 0^\circ$, $\psi = 30^\circ$, $\psi = 40^\circ$, $\psi = 50^\circ$, за результатами будуємо $\sin^2\psi$ -графік.

За плоского напруженого стану $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_b = 400 \text{ МПа} = 40 \text{ кг/мм}$.

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{1,17661 - 1,766}{1,776} = -0,840 \cdot 10^{-3}$$

$$d_{\perp} = \frac{-\mu}{E}(\sigma_1 + \sigma_2)d_0 + d_0 \quad (4.4)$$

$$d_{\perp} = \frac{-0,3}{288 \cdot 10^2} (40 + 40) \cdot 1,776 + 1,776 = 1,776 \text{ \AA}$$

$$\varepsilon_{\varphi\psi 30} = -0,482 \cdot 10^{-3}, \varepsilon_{\varphi\psi 40} = -0,253 \cdot 10^{-3}, \varepsilon_{\varphi\psi 50} = 0,004 \cdot 10^{-3}$$

Отримані значення заносимо в таблицю 4.1.

Таблиця 4.1 – Дані для побудови $\sin^2\psi$ -графіка за плосконапруженого стану

ψ	0	30	40	50
$\sin^2\psi$	0	0,25	0,41	0,59
$\varepsilon_{\varphi\psi}$	$-0,840 \cdot 10^{-3}$	$-0,482 \cdot 10^{-3}$	$-0,253 \cdot 10^{-3}$	$0,004 \cdot 10^{-3}$
$d_{\varphi\psi}$	1,1766	1,1770	1,1773	1,1776

За табличними даними будуємо $\sin^2\psi$ -графік (рис. 4.1)

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{d_{\perp} - d_0}{d_0}$$

$$\varepsilon_{\perp} = -\frac{\mu}{E}(\sigma_1 + \sigma_2)$$

$$d_{\perp} = -\frac{\mu}{E}(\sigma_1 + \sigma_2)d_0 + d_0$$

$$d_{\varphi\psi} = \frac{1 + \mu}{E} \sigma_x \sin^2 \psi d_0 + d_{\perp} \tag{4.5}$$

Результати розрахунків занесені в таблицю 4.1 та по даним таблиці будують графік.

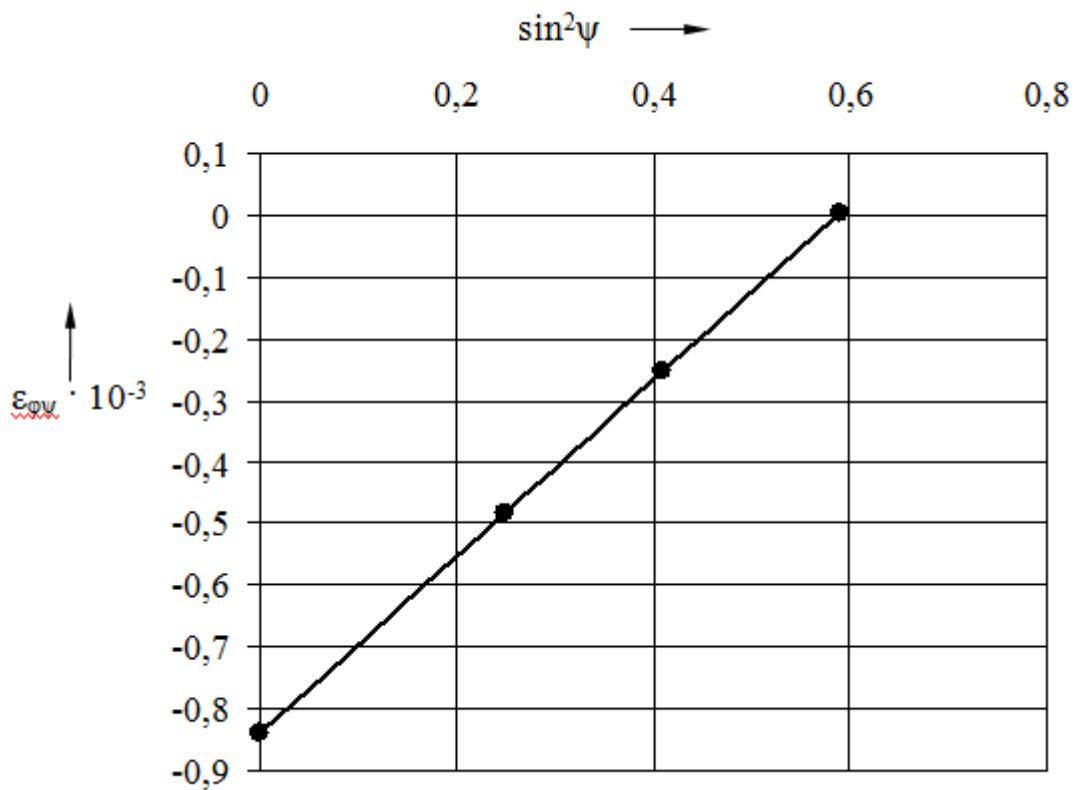


Рисунок 4.1 – $\sin^2 \psi$ графік

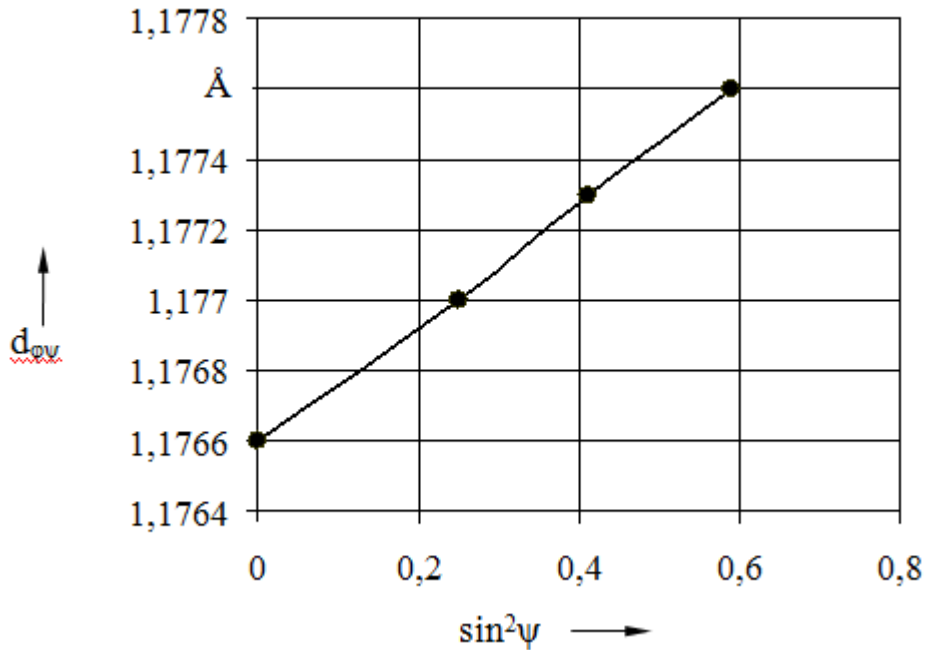


Рисунок 4.2 – Залежність $d_{\varphi\psi} = f(\sin^2\psi)$

5. Визначення субструктурних характеристик методом апроксимацій

Визначення розмірів блоків (L) і рівня мікрODEформацій (ϵ) базується на аналізі ширини дифракційної лінії.

B – виміряна ширина дифракційної лінії, мрад ($B_1 = 12,4$ мрад, $B_2 = 50$ мрад);

b – ширина дифракційної лінії, пов'язана з геометрією зйомки, визначається шляхом зняття дифракційної лінії від еталона. Як еталон використовуємо відпалений зразок ($\epsilon_1 = 2$ мрад, $\epsilon_2 = 9$ мрад).

Рентгенографічно визначаються розміри блоків менше 1000 \AA , тоді розширення від еталона буде пов'язане тільки з геометричним фактором (юстуванням приладу).

β – фізичне розширення, яке зумовлене розмірами блоків (областями когерентного розсіювання) і мікрODEформаціями.

Апроксимація полягає в тому, що підбираємо найбільш підходящу функцію, яка описує профіль лінії. Виявилось, що найбільш підходящими є: функція Гауса і Коші.

У випадку Гауса отримуємо:

$$B^2 = b^2 + \beta^2 \quad (5.1)$$

$$\beta^2 = \beta_L^2 + \beta_\varepsilon^2 \quad (5.2)$$

У випадку Коші отримуємо:

$$B = b + \beta \quad (5.3)$$

$$\beta = \beta_L + \beta_\varepsilon \quad (5.4)$$

$$\beta_L = \frac{k\lambda}{L\cos\theta} \quad (5.5)$$

$$\beta_\varepsilon = 4\text{tg}\theta\varepsilon \quad (5.5)$$

Для визначення розмірів блоків і рівня мікрODEформацій будуємо графіки Холла, використовуючи функції Гауса і Коші (рис. 5.1). Вибираємо випромінювання, яке б влаштувало метод апроксимації. У цьому випадку це випромінювання заліза ($\theta = 28,3^\circ$, $\theta = 71,8^\circ$), $\lambda_{\text{Fe}} = 1,9373 \text{ \AA}$.

Результати обчислень заносимо в таблицю 5.1.

Оскільки умова: $\cos\theta_{110}/\cos\theta_{220} < \beta_{220}/\beta_{2110} < \text{tg}\theta_{220}/\text{tg}\theta_{110}$ ($2,8 < 4 < 5,7$), виконується, то це свідчить про те, що розширення викликане як рівнем мікрODEформації, так і розміром блоків.

Користуючись функціями Гауса і Коші (рис. 5.1) визначаємо L і ε .

$$\text{Коші: } 1/L = 2,7 \cdot 10^{-3};$$

$$L = 370 \text{ \AA};$$

$$\varepsilon = \text{tg}\alpha = 4,3 \cdot 10^{-3}/1,96 = 2,1 \cdot 10^{-3};$$

$$\varepsilon = 0,21 \text{ \%}.$$

$$\text{Гаусс: } 1/L^2 = 17,5 \cdot 10^{-6};$$

$$L^2 = 57142,8 \cdot 10^{-3};$$

$$L = 239 \text{ \AA};$$

$$\varepsilon^2 = \text{tg}\alpha = 31,68 \cdot 10^{-6}/3,84 = 8,25 \cdot 10^{-6};$$

$$\varepsilon = 2,87 \cdot 10^{-3};$$

$$\varepsilon = 0,28 \text{ \%}.$$

Таблиця 5.1 – Результати розрахунків розмірів блоків та рівня мікродеформації

hkl	$\theta, ^\circ$	B	b	β	$\frac{\beta \cos \theta}{\lambda} \left(\frac{\beta \cos \theta}{\lambda} \right)^2$	$\frac{4 \sin \theta}{\lambda} \left(\frac{4 \sin \theta}{\lambda} \right)^2$	L, \AA		$\varepsilon, \%$	
							Га- усс	Коші	Га- усс	Коші
110	28,3	12,4	2	10,9	4,95	0,97	239	370	0,28	0,21
					24,54	0,95				
220	71,8	50	9	43,5	7,01	1,96	239	370	0,28	0,21
					49,18	3,84				

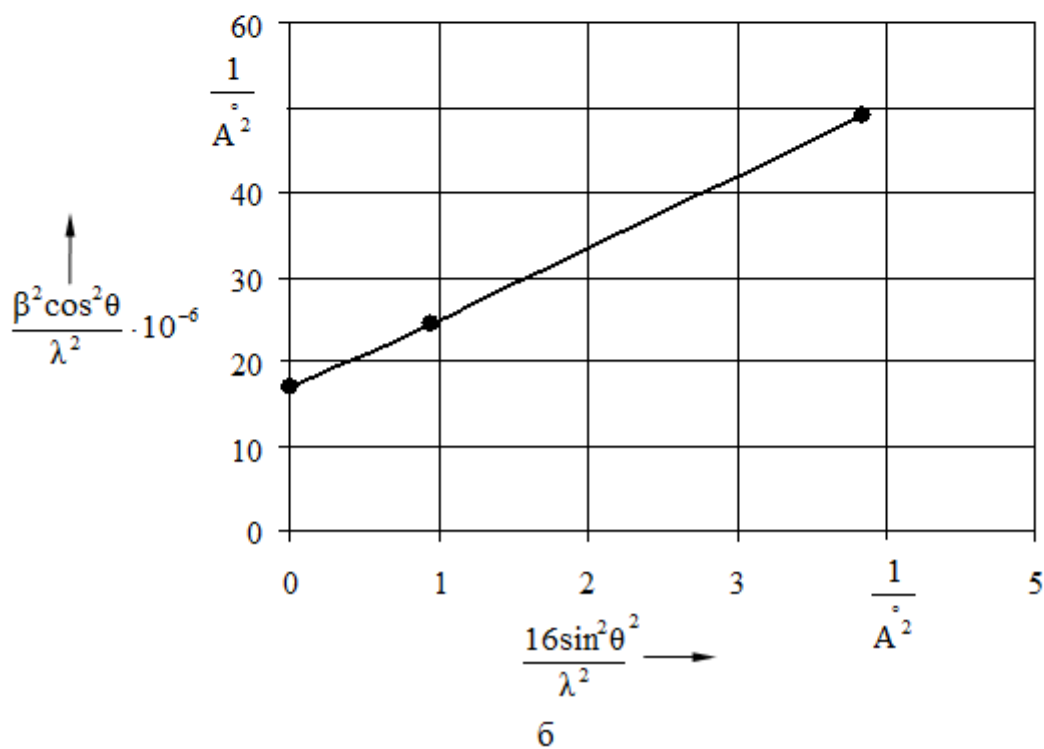
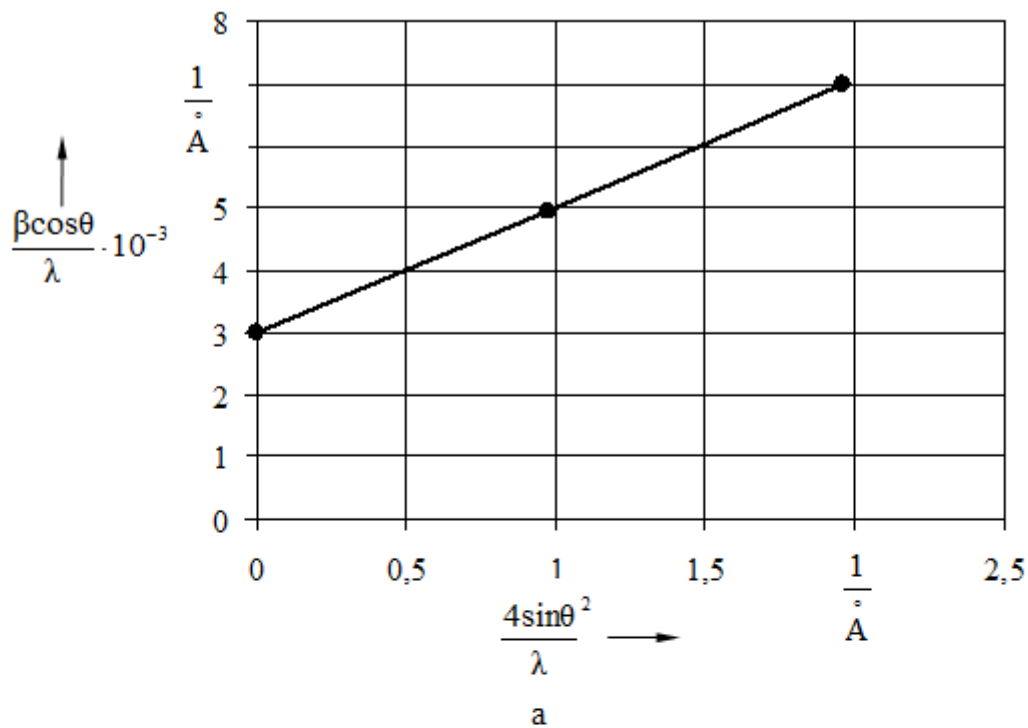


Рисунок 5.1 – Графік Холла:
a – за Коші; *б* – за Гауссом

6. Рентгенографічне визначення густини речовини

Густина речовини визначається рентгенографічно за формулою (6.1)

$$\rho = \frac{N \cdot Ar \cdot 1,66 \cdot 10^{-24}}{V_{\text{ком}}} \quad (6.1)$$

де N – базис кристалічної ґратки ($N = 2$, оскільки у Cr ОЦК-ґратка); Ar – атомна вага; $Ar = 52,01$; $V_{\text{ком}}$ – об'єм комірки.

Оскільки хром має кубічну об'ємно-центровану ґратку, то об'єм комірки визначають за формулою (6.2)

$$V_{\text{ком}} = a^3 \quad (6.2)$$

де a – період кристалічної ґратки хрому; $a = 2,884 \text{ \AA}$.

$$\rho = \frac{2 \cdot 52,01 \cdot 1,66 \cdot 10^{-24}}{(2,884 \cdot 10^{-8})^3} = \frac{172,673 \cdot 10^{-24}}{23,9875 \cdot 10^{-24}} = 7,198, \text{ г/см}^3$$

За довідковими даними [4] $\rho_{\text{Cr}} = 7,19 \text{ г/см}^3$.

7. Визначення коефіцієнта термічного розширення

Коефіцієнт термічного розширення показує, на скільки зміниться лінійний розмір твердого тіла при зміні температури на один градус.

$$\alpha = \frac{a_1 - a_0}{a_0(t_2 - t_1)} \quad (7.1)$$

де α – коефіцієнт термічного розширення, $\alpha = 6,25 \cdot 10^{-6} \text{ 1/град}$; a_1 і a_0 – періоди ґратки при температурах t_1 і t_2 відповідно

$$a_0 = a_1(1 + \alpha \Delta T) \quad (7.2)$$

Для рентгенографічного визначення a необхідно побудувати графік залежності періоду ґратки від температури. Знаючи, що період ґратки хрому за $20\text{ }^\circ\text{C}$ дорівнює $2,884\text{ \AA}$, розраховуємо період ґратки за різних температур, згідно з формулою (7.2) і результати заносимо в таблицю 7.1.

Таблиця 7.1 - Значення періоду ґратки

$T, \text{ }^\circ\text{C}$	20	100	300	500	700	950
$a, \text{ \AA}$	2,884	2,8854	2,889	2,8926	2,8962	2,9007

За табличними даними будуюмо графік залежності періоду ґратки від температури (рис. 7.1).

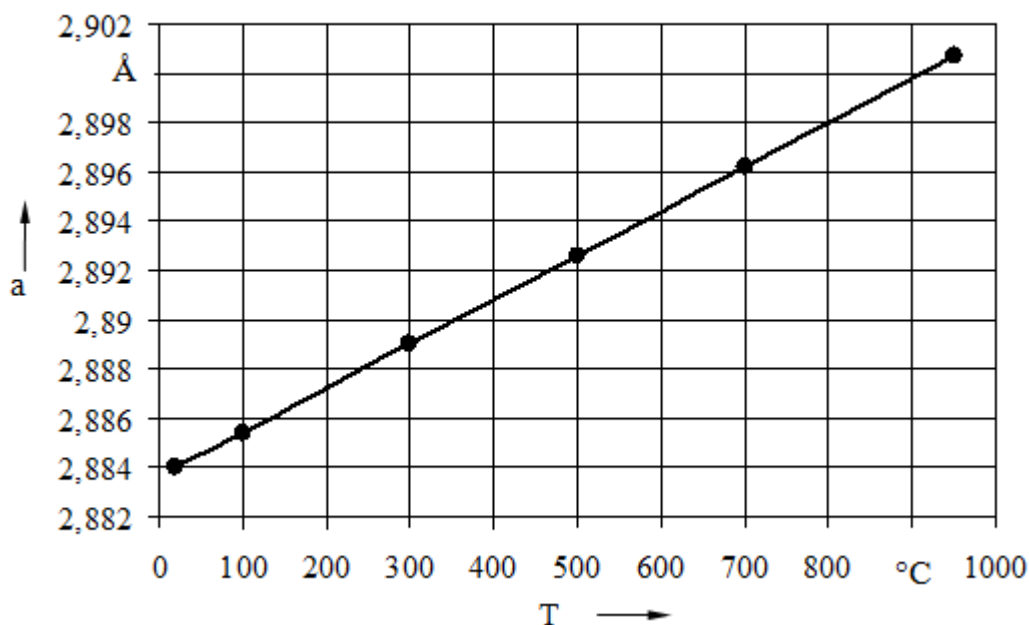


Рисунок 7.1 – Залежність періоду ґратки від температури

Висновок

У даному розрахунковому завданні для хрому було розраховано: інтенсивність дифракційних відображень, прецизійне визначення періоду кристалічної ґратки, визначення коефіцієнта термічного розширення, величину макронапружень.

Було побудовано теоретичну текстуродіаграму, було проведено визначення розмірів блоків і рівня мікродеформації хрому методом апроксимації.

Отже, можна зробити висновок, що застосування дифракції рентгенівських променів дає змогу вирішувати доволі широке коло питань.

**4. ВАРІАНТИ ІНДИВІДУАЛЬНИХ ЗАВДАНЬ
(РОЗРАХУНКОВИХ ЗАВДАНЬ)**

№ варіанту	Матеріал	№ варіанту	Матеріал
1	Al	11	Cd
2	Cu	12	Ag
3	Fe	13	W
4	Ti	14	Mo
5	Au	15	Pt
6	Li	16	Sn
7	Mg	17	Be
8	Zn	18	Sr
9	Ca	19	Pd
10	Ni	20	Ba

5. РЕКОМЕНДАЦІЇ ЩОДО ОФОРМЛЕННЯ ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (РОЗРАХУНКОВОГО ЗАВДАННЯ)

Відповідно до навчального плану спеціальності G8 «Матеріалознавство» індивідуальне завдання (розрахункове завдання) з навчальної дисципліни «Спеціальні задачі та методи рентгеноструктурного аналізу» виконується самостійно.

У процесі виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання) студенти закріплюють здобуті теоретичні знання з матеріалознавства, опановують навички роботи з науково-технічною та довідковою літературою.

Індивідуальне завдання (розрахункове завдання) вимагає від студентів використання теоретичних положень навчальної дисципліни «Спеціальні задачі та методи рентгеноструктурного аналізу» для розв'язання прикладних і наукових задач, пов'язаних з аналізом кристалічних структур матеріалів. Структура індивідуального завдання (розрахункового завдання) спрямована на творчий пошук та індивідуальний підхід у побудові та проведенні аналізу діаграм стану подвійних сплавів, сприяє розширенню ерудиції майбутнього інженера.

Кожен студент виконує свій варіант індивідуального завдання (розрахункового завдання), який відрізняється від інших. Робота виконується під керівництвом викладача, який у встановленому порядку видає студенту індивідуальне завдання (розрахункове завдання) для виконання, графік його виконання, надає студенту методичну допомогу, необхідну студенту для розв'язання окремих питань, рекомендує необхідну літературу, проводить систематичні консультації за розкладом і контролює хід виконання роботи.

Індивідуальне завдання (розрахункове завдання) оформлюється відповідно до вимог, викладених нижче. Його захист відбувається в установлений термін.

Копіювання матеріалів інших робіт, підручників, конспектів, методичних вказівок, інших джерел не допускається. Однак допускається використання таких матеріалів за умови обов'язкового посилання на них відповідно до встановлених правил. Загальні положення, аналізу діаграм стану подвійних сплавів, висновки викладаються в тексті індивідуального завдання (розрахункового завдання) самостійно.

Побудування індивідуального завдання (розрахункового завдання) має

бути максимально наближеним до класичної наукової роботи. Вимоги до структури і оформлення якої регламентуються СТЗВО-ХПІ-3.01-2025. Система стандартів з організації навчального процесу. Текстові документи у сфері навчального процесу. Загальні вимоги до виконання.

У встановлений термін, до захисту індивідуального завдання (розрахункового завдання) студент зобов'язаний представити викладачу для перевірення його текстову частину у переплетеному вигляді, яка повинна послідовно містити такі структурні елементи:

- титульний аркуш (див. Додаток 1);
- основну частину;
- список джерел інформації.

Аркуш з переліком питань завдання розташовується після титульного аркушу роботи та не входить в загальну кількість аркушів.

Список джерел інформації являє собою список літератури та електронних ресурсів, звідки був запозичений фактичний матеріал, необхідний для виконання індивідуального завдання (розрахункового завдання). Цей список складають у порядку появи посилань у тексті роботи. Посилання на літературу в тексті роботи розміщують у квадратних дужках після відповідної цитати, наприклад [7]. В даному випадку «7» – це номер у списку літератури тієї публікації, на яку посилається автор. У списку джерел інформації, посилання на кожне джерело записують з абзацу і нумерують арабськими числами. Оформлення списку джерел інформації виконується згідно з СТЗВО-ХПІ-3.01-2025.

Текстову частину індивідуального завдання (розрахункового завдання) оформляють відповідно до вимог СТЗВО-ХПІ-3.01-2025, державною мовою, за допомогою засобів комп'ютерної техніки. Текст роботи друкують з одного боку на аркушах білого паперу формату А4 (210×297 мм), розташування сторінок – книжне, залишаючи береги таких розмірів: лівий – 3 см, правий – 1,5 см, верхній і нижній – 2 см. При наборі тексту висота букв повинна бути не меншою 2,5 мм. Рекомендується використовувати шрифт Times New Roman (кегель 14) з міжрядковим інтервалом 1,5 і вирівнювання за шириною сторінки. Перший рядок кожного абзацу необхідно починати з відступом на 1 см. Відстань між абзацами така сама, як і між рядками у абзаці – 1,5 інтервали. Шрифт друку повинен бути чітким, чорного кольору, а щільність тексту роботи однаковою. Заголовок першого розділу завдання необхідно друкувати великими літерами жирним шрифтом з

вирівнюванням по центру «ОСНОВНА ЧАСТИНА» друкується. Кожне нове питання індивідуального завдання (розрахункового завдання) необхідно починати з нового аркушу. Заголовок – «СПИСОК ДЖЕРЕЛ ІНФОРМАЦІЇ» не нумерується. Нумерацію подають арабськими цифрами без знаку §, № і т. п., з крапкою після цифри. Таблиці і рисунки слід розміщувати в тексті безпосередньо після їх першого згадування. Всі сторінки роботи, включаючи список використаних джерел, підлягають нумерації на загальних засадах. Першою сторінкою роботи є титульний аркуш, який включають до загальної нумерації сторінок роботи. На титульному аркуші (сторінка 1) та на аркуші із завданням до індивідуального завдання (розрахункового завдання) (не входить в загальну кількість сторінок) номер сторінок не ставлять. Нумерація починається із сторінки основної частини де розкривається перше питання, та здійснюється у правому верхньому куті сторінки без крапки. Рисунки, таблиці та формули нумерують послідовно арабськими цифрами. Порядкові номери позначають арабськими цифрами у круглих дужках на сторінці праворуч на рівні відповідної формули. Наприклад: «(2.1)» – перша формула другого питання. Кожний рисунок (схема, діаграма, графік) повинний мати порядковий номер та назву, які необхідно розміщувати під ним без крапки. Наприклад: «Рисунок 3.1 – Залежність періоду решітки від температури». У тексті де викладено матеріал, який пов'язаний з рисунком на який необхідно вказати розміщують посилання у круглих дужках «(рис. 3.1)», або «див. рис. 3.1». Кожна таблиця повинна мати порядковий номер та назву, які необхідно розміщувати над таблицею посередині рядка. Наприклад: «Таблиця 1.1 – Дані для побудови $\sin^2\psi$ - графіка за плосконапруженого стану». При перенесенні частини таблиці на наступну сторінку, слово «Таблиця» та її назва вказуються один раз над першою частиною таблиці, а над іншими частинами пишуть: «Продовження табл.», «Закінчення табл.» із зазначенням її номера.

ДОДАТКИ

Додаток 1

Зразок оформлення титульного аркуша

Міністерство освіти і науки України

**Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут»**

Кафедра «Матеріалознавство»

РОЗРАХУНКОВЕ ЗАВДАННЯ

з навчальної дисципліни

«Спеціальні задачі та методи рентгеноструктурного аналізу»

Виконав(а)

ст. гр. МІТ-

Перевірив

Дата виконання роботи

Особистий підпис студента

Харків – 202_

НАВЧАЛЬНО-МЕТОДИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Весельська О. Я., Спасьонова Л. М. Сучасні інструментальні методи досліджень в технології кераміки та скла : підручник для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія», освітньої програми «Хімічні технології неорганічних в'язучих речовин, кераміки, скла та полімерних і композиційних матеріалів» / КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 5,3 Мбайт). Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023. 158 с. URL: <https://ela.kpi.ua/bitstreams/c9c78fbe-5702-4477-baa4-104afc611b32/download>
2. Диха О. В., Рудик О. Ю. Контроль якості покриттів : навч. посіб. Хмельницький : ХНУ, 2021. 167 с. URL: <https://elar.khmnu.edu.ua/bitstreams/1dd5b8f1-f890-4f35-8daa-118341a5721a/download>
3. Лобачова Г. Г., Іващенко Є. В. Методи структурного аналізу матеріалів : навч. посіб. для здобувачів ступеня бакалавр за освітньою програмою «Інжиніринг та комп'ютерне моделювання в матеріалознавстві» спеціальності 132 Матеріалознавство / КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 4,21 Мбайт). Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. 180 с. URL: <https://ela.kpi.ua/bitstreams/372c4994-f774-4e23-8ad4-e919857edd9f/download>
4. Сусліков Л. М., Дьордяй В. С. Фізика і технологія наноматеріалів : навч. посіб. для студентів фізико-технічних спеціальностей. Ужгород : Видавництво «Говерла», 2023. 437 с. URL: <https://dspace.uzhnu.edu.ua/jspui/bitstream/lib/56783/1/9A.pdf>
5. Феденко Ю. М., Донцова Т. А., Іваненко І. М. Сучасний інструментальний аналіз неорганічних речовин : навч. посіб. для здобувачів ступеня магістра за освітньою програмою «Хімічні ресурсоефективні технології неорганічних та органічних речовин, матеріалів та покриттів» спеціальності 161 Хімічні технології та інженерія / КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 4,01 Мбайт). Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2023. 177 с. URL: <https://ela.kpi.ua/bitstreams/5bf0ad30-9fa4-4982-bcf8-6851a75a9982/download>
6. Спектральні методи аналізу : навч. посіб. / О. В. Москаленко, С. А. Циганков, В. О. Янченко, А. С. Циганков. Ніжин : Видавництво НДУ імені Миколи Гоголя, 2022. 276 с. URL:

<http://erpub.chnpu.edu.ua:8080/jspui/bitstream/123456789/9200/1/%D0%A1%D0%BF%D0%B5%D0%BA%D1%82%D1%80%D0%B0%D0%BB%D1%8C%D0%BD%D1%96%20%D0%BC%D0%B5%D1%82%D0%BE%D0%B4%D0%B8%20%D0%B0%D0%BD%D0%B0%D0%BB%D1%96%D0%B7%D1%83.pdf>

7. Мудрий С. І., Кулик Ю. О., Якимович А. С. Рентгеноструктурний аналіз у матеріалознавстві : навч.-метод. посіб. для вищ. навч. закл. Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2017. 226 с. URL: https://physics.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/rsa_materialozn.pdf

8. Бутенко Т. І., Колінько С. О., Ващенко В. А. Конспект лекцій з дисципліни «Контроль структури, елементного та фазового складу матеріалів» для здобувачів освітнього ступеня бакалавр за спеціальностями галузі знань 13 «Механічна інженерія» денної форми навчання / М-во освіти і науки України, Черкас. держ. технол. ун-т. Черкаси : ЧДТУ, 2021. 75 с. URL: <https://er.chdtu.edu.ua/bitstream/ChSTU/2942/1/B8.pdf>

9. Шпетний І. О. Конспект лекцій з дисципліни «Сучасні експериментальні методи дослідження властивостей матеріалів в прикладній фізиці та наноматеріалознавстві». Суми : Сумський державний університет, 2022. 173 с. URL: <https://ezpf.elit.sumdu.edu.ua/wp-content/uploads/2021/10/%D0%9A%D0%BE%D0%BD%D1%81%D0%BF%D0%B5%D0%BA%D1%82-%D0%BB%D0%B5%D0%BA%D1%86%D1%96%D0%B9.pdf>

10. Карпець М. В., Сидоренко С. І., Бурмак А. П. Сучасні експериментальні методи аналізу низькорозмірних структур. Лаб. практикум. Частина 2 : навч. посіб. для студентів, які навчаються за спеціальністю 132 «Матеріалознавство», освітньою програмою «Інжиніринг та комп'ютерне моделювання в матеріалознавстві» / КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 2,19 Мбайт). Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. 113 с. URL: https://ela.kpi.ua/bitstream/123456789/45853/1/Suchasni_eksperymentalni_metody_LP_2021.pdf

11. Кодекс етики академічних взаємовідносин та доброчесності Національного технічного університету «Харківський політехнічний інститут» СУЯ ХПІ-ВЗЯОД-МР/10.1:2023. URL: <https://blogs.kpi.kharkov.ua/v2/nv/wp-content/uploads/sites/43/2024/04/Kodeks-etyky-akademichnyh-vzayemovidnosyn-ta-dobrochesnosti-Natsionalnogo-tehnichnogo-universytetu-Harkivskyj-politehnicnyj-institut-.pdf>

12. СТЗВО-ХПІ-3.01-2025. Система стандартів з організації навчально-го процесу. Текстові документи у сфері навчального процесу. Загальні вимоги до виконання. – На заміну СТЗВО-ХПІ-3.01-2021 ; [чинний з 2025-03-01]. Харків : НТУ «ХПІ», 2025. 43 с. URL: <https://blogs.kpi.kharkov.ua/v2/metodotdel/wp-content/uploads/sites/28/2025/06/STZVO-HPI-3.01-2025-2.pdf>

ІНФОРМАЦІЙНІ РЕСУРСИ В ІНТЕРНЕТІ

1. <https://studfiles.net/>

ЗМІСТ

ВСТУП.....	3
1. ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ.....	5
2. ПРИКЛАД ВИКОНАННЯ ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (РОЗРАХУНКОВОГО ЗАВДАННЯ)	8
3. ВАРІАНТИ ІНДИВІДУАЛЬНИХ ЗАВДАНЬ (РОЗРАХУНКОВИХ ЗАВДАНЬ).....	27
4. РЕКОМЕНДАЦІЇ ЩОДО ОФОРМЛЕННЯ ІНДИВІДУАЛЬНОГО ЗАВДАННЯ (РОЗРАХУНКОВОГО ЗАВДАННЯ).....	28
ДОДАТОК 1.....	31
НАВЧАЛЬНО-МЕТОДИЧНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ.....	32
РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА.....	32
ІНФОРМАЦІЙНІ РЕСУРСИ В ІНТЕРНЕТІ.....	34

Навчальне видання

Методичні вказівки
до виконання індивідуального завдання
(розрахункового завдання)
з навчальної дисципліни «Спеціальні задачі
та методи рентгеноструктурного аналізу»
для студентів денної та заочної форм навчання
за спеціальністю G8 «Матеріалознавство»

Укладачі:

БІЛОЗЕРОВ Валерій Володимирович
СУББОТІНА Валерія Валеріївна
СУББОТІН Олександр Володимирович
ФЕДОРЕНКО Ганна Анатоліївна

Відповідальна за випуск проф. Субботіна В. В.
Роботу до видання рекомендувала проф. Пономаренко О. І.

В авторській редакції

План 2026 р., поз. 271

Гарнітура Times New Roman. Ум. друк. арк.

Видавничий центр НТУ «ХП».

Свідоцтво про державну реєстрацію ДК № 5478 від 21.08.2017 р.

61002, Харків, вул. Кирпичова, 2.

Електронне видання