

Программа курсов повышения квалификации по теме: «Рентгеноструктурный анализ»

Тема 1. *Рассеяние рентгеновских лучей простой кристаллической решеткой*

Дифракция рентгеновских лучей в одномерной, двухмерной и трехмерной решетках. Интенсивность спектра дифракционной решетки. Уравнение Лауэ. Геометрия дифракционной картины. Вид рентгенограмм. Условия возникновения дифракции.

Тема 2. *Дифракция как отражение*

Формула Вульфа-Брэгга. Связь между индексами дифракции и индексами плоскостей. Дифракционное уравнение трехмерной решетки. Интерференционная функция и ее отображение в обратном пространстве. Сфера отражения. Интерпретация методов рентгеноструктурного анализа с помощью сферы отражения и обратной решетки. Дифракционный фактор и обратная решетка. Протяженность и форма узлов обратной решетки.

Тема 3. *Рассеяние рентгеновских лучей сложной решеткой*

Фурье-трансформанты элементарной ячейки (структурная амплитуда). Фурье-трансформанта решеток Бравэ. Законы погасания для решеток Бравэ. Общие погасания для разных элементов симметрии. Структурная амплитуда вставленных друг в друга сложных решеток.

Тема 4. *Метод Дебая (метод порошков)*

Геометрия дифракционной картины и вид рентгенограмм. Расчет дебаеграмм. Аналитические и графические методы индирования дебаеграмм. Индирование по двум рентгенограммам, полученным при разных температурах. Точность определения межплоскостных расстояний и параметров решетки и меры к ее увеличению. Метод экстраполяции, метод съемки с внутренним стандартом, использование камер для «обратной» съемки. Методы фокусирования линий.

Тема 5. *Метод вращения*

Геометрия дифракционной картины и вид рентгенограмм; слоевые линии. Расчет рентгенограмм. Определение периодов идентичности, параметров решетки, решетки Бравэ, объема элементарной ячейки и числа частиц в элементарной ячейке. Индирование рентгенограмм вращения. Графический метод индирования. Использование интерференционных кривых для индирования и определения решетки Бравэ. Рентгеновские гониометры.

Тема 6. *Рабочие формулы интенсивности для различных методов*

Метод вращения. Метод «порошка».

Тема 7. *Факторы интегральной интенсивности*

Множители: Лоренца, поглощения, геометрический, повторяемости.

Тема 8. *Фактор повторяемости*

Фактор повторяемости в методе Дебая. Формула интегрального отражения для кристаллического порошка, цилиндрического образца. Фактор повторяемости в методе вращения.

Тема 9. *Рентгенографическое определение текстур*

Аксиальная текстура. Конус положений и конус направлений. Способы определения индексов оси аксиальной текстуры.

Тема 10. *Определение величины мелких кристалликов и микродеформаций по эффекту дифракционного размытия*

Формула Селякова. Метод аппроксимации. Определение физического уширения методом гармонического анализа. Раздельное определение микродеформаций (микронапряжений) и величины блоков.

Тема 11. Рентгенографическое определение макронапряжений

Раздельное определение главных напряжений. Методика рентгено съемок.

Тема 12. Фазовый анализ

Качественный и количественный фазовый анализ. Методы подмешивания, независимого эталона и гомологических пар.

Тема 13. Интенсивность рассеянных рентгеновских лучей

Пути расчета. Вывод формулы интенсивности рассеянных рентгеновских лучей. Структурный анализ газов, эксперимент. Рентгенография жидких и аморфных систем.