

Э. В. Суворов

ДИФРАКЦИОННЫЙ СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ
ДЛЯ АКАДЕМИЧЕСКОГО БАКАЛАВРИАТА

*Рекомендовано Учебно-методическим отделом высшего образования
в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений,
обучающихся по инженерно-техническим и естественнонаучным
направлениям*

**Книга доступна в электронной библиотеке biblio-online.ru,
а также в мобильном приложении «Юрайт.Библиотека»**

Москва ■ Юрайт ■ 2019

УДК 539.26(075.8)
ББК 22.343.4я73
С89

Автор:

Суворов Эрнест Витальевич — профессор, доктор физико-математических наук, профессор факультета фундаментальной физико-химической инженерии Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова, главный научный сотрудник Института физики твердого тела Российской академии наук (г. Черноголовка).

Рецензенты:

Шмытько И. М. — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории структурных исследований Института физики твердого тела Российской академии наук (г. Черноголовка);

Страумал Б. В. — доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией поверхности раздела в металлах Института физики твердого тела Российской академии наук (г. Черноголовка).

Суворов, Э. В.

С89

Дифракционный структурный анализ : учебное пособие для академического бакалавриата / Э. В. Суворов. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 272 с. — (Бакалавр. Академический курс). — Текст : непосредственный.

ISBN 978-5-534-09995-9

В пособии рассмотрены физические основы кристаллографии, основы теории дифракции на трехмерной решетке (подход Лауэ), методы получения рентгеновского излучения и его основные свойства, основные направления структурного анализа, физические основы динамической теории рассеяния, интегральные методы анализа формы дифракционной линии, методы рентгеновской топографии, рассеяние под малыми углами. В каждую главу включены примеры решения типовых задач по изучаемой теме, приведены контрольные вопросы и задания, задачи для самостоятельной работы, а также рекомендуемая литература. В конце пособия помещен ряд приложений, в которых приведены сведения, необходимые для успешного овладения изучаемой дисциплиной.

Содержание учебного пособия соответствует актуальным требованиям Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования.

Для студентов высших учебных заведений, обучающихся по инженерно-техническим и естественнонаучным направлениям.

Российская академия наук
БИБЛИОТЕКА
НАУЧНОГО ЦЕНТРА
в Черноголовке

УДК 539.26(075.8)
ББК 22.343.4я73



Все права защищены. Никакая часть данной книги не может быть воспроизведена в какой бы то ни было форме без письменного разрешения владельцев авторских прав. Правовую поддержку издательства обеспечивает юридическая компания «Дельфи».

ISBN 978-5-534-09995-9

© Суворов Э. В., 2019
© ООО «Издательство Юрайт», 2019

Оглавление

Предисловие	7
Введение.....	10
Условные обозначения	14
Глава 1. Основные понятия геометрической кристаллографии.....	16
1.1. Краткий экскурс в историю кристаллографии.....	16
1.2. Методы изображения и описания элементов кристаллической решетки.....	18
1.3. Индексы Миллера.....	21
1.4. Обратная решетка и ее свойства	22
1.5. Кристаллографическая зона	27
1.6. Кристаллографические проекции	28
1.7. Примеры решения типовых задач	31
<i>Контрольные вопросы и задания</i>	38
<i>Задачи для самостоятельной работы</i>	38
<i>Рекомендуемая литература</i>	39
Глава 2. Симметрия кристаллической решетки: основные понятия	40
2.1. Понятие симметрии. Кристаллографические системы. Решетки Браве	40
2.2. Основные симметрические операции в кристаллической решетке.....	44
2.3. Точечные группы симметрии.....	45
2.4. Трансляционная симметрия	47
2.5. Кристаллографические обозначения элементов симметрии	50
2.6. Пространственные группы симметрии	51
2.7. Примеры решения типовых задач	56
<i>Контрольные вопросы и задания</i>	62
<i>Задачи для самостоятельной работы</i>	63
<i>Рекомендуемая литература</i>	63
Глава 3. Введение в физику рассеяния рентгеновских волн веществом	64
3.1. Основы физики дифракции.....	64
3.2. Рентгеновские лучи.....	70
3.3. Рассеяние рентгеновских лучей на свободных электронах.....	76
3.4. Рассеяние рентгеновских лучей на трехмерной периодической кристаллической решетке (кинематическое приближение). Интерференционная функция Лауэ	80

3.5. Геометрическая интерпретация условий дифракции по Эвальду	85
3.6. Рассеяние на сложной решетке	88
3.7. Интерпретация явлений дифракции на основе понятий прямой и обратной решеток.....	91
3.8. Влияние температуры на амплитуду рассеяния рентгеновских волн.....	92
3.9. Рассеяние рентгеновских волн на объектах с неупорядоченной структурой	96
3.10. Атомный фактор рассеяния	102
3.11. Примеры решения типовых задач	111
<i>Контрольные вопросы и задания</i>	125
<i>Задачи для самостоятельной работы</i>	126
<i>Рекомендуемая литература</i>	127
Глава 4. Физические основы динамической теории рассеяния...	128
4.1. Основные уравнения динамической теории рассеяния	128
4.2. Анализ дисперсионных уравнений	131
4.3. Основные следствия динамической теории рассеяния	137
4.4. Уравнения Такаги — Топена	141
4.5. Примеры решения типовых задач.....	143
<i>Контрольные вопросы и задания</i>	145
<i>Задачи для самостоятельной работы</i>	146
<i>Рекомендуемая литература</i>	146
Глава 5. Методы анализа дифракционной картины.	
Получение структурных параметров исследуемого материала ...	147
5.1. Основные сведения о структуре материалов	147
5.2. Анализ геометрии дифракционной картины	151
5.2.1. Наиболее распространенные фотометоды рентгеноструктурного анализа.....	151
5.2.2. Методы рентгеновской дифрактометрии	166
5.2.3. Влияние геометрических параметров эксперимента на величину измеренных интенсивностей дифракционных отражений	172
5.3. Анализ массивов интенсивностей дифракционных рефлексов	176
5.3.1. Роль фазы в структурном анализе.....	176
5.3.2. Основные методы решения фазовой проблемы	178
5.4. Исследование формы и тонкой структуры дифракционных рефлексов. Методы исследования реальной структуры кристаллов ...	184
5.4.1. Интегральные методы исследования реальной структуры кристаллов	185
5.4.2. Прямые методы исследования дефектов в кристаллах	188
5.5. Примеры решения типовых задач.....	206
<i>Контрольные вопросы и задания</i>	211
<i>Задачи для самостоятельной работы</i>	212
<i>Рекомендуемая литература</i>	212

Глава 6. Рассеяние под малыми углами. Введение в физику малоуглового рассеяния	214
6.1. К понятию «малоугловое рассеяние».....	214
6.2. Физические основы малоуглового рассеяния	215
6.3. Малоугловое рассеяние на жидкости со случайно распределенными частицами одинаковой формы	216
6.4. Области применения малоуглового рассеяния	219
<i>Контрольные вопросы и задания</i>	220
<i>Рекомендуемая литература</i>	220
Заключение.....	221
Список литературы	222
Приложение 1. Краткий биографический справочник	224
Приложение 2. Основные структурные характеристики химических элементов таблицы Менделеева.....	244
Приложение 3. Некоторые мировые константы, массы химических элементов.....	245
Приложение 4. Основные единицы измерений	247
Приложение 5. Используемый в пособии математический аппарат.....	250
Приложение 6. Стереографические проекции кубического кристалла	254
Приложение 7. Теоремы и выводы формул структурной кристаллографии	258
Приложение 8. Длины волн излучений в структурном анализе... 	267
Приложение 9. Основные закономерности и структурные характеристики кристаллов.....	269