

Министерство образования Республики Беларусь
БЕЛОРУССКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра физики

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПЕСКА МЕТОДОМ
РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕРИИ

Методические указания к лабораторной работе

М и н с к 2 0 0 5

УДК 669.2

В методических указаниях приведены особенности кристаллического строения и свойств песка, излагаются основы метода порошковой рентгеновской дифрактометрии, представлена методика расчета рентгеновских дифракционных картин для различных типов кристаллических структур песка SiO_2 .

Издание предназначено для студентов инженерно-технических специальностей всех видов обучения.

Составители:

П.Г. Кужир, Г.К. Савчук, Н.П. Юркевич

Рецензенты:

И.А.Сатиков, В.А.Вилькоцкий

© Кужир П.Г., Савчук Г.К.,
Юркевич Н.П., составление, 2005

Цель работы

Изучить основные закономерности дифракции рентгеновских лучей в кристаллах, ознакомиться с основами метода порошковой рентгенографии, при помощи программы произвести расчет рентгеновских дифракционных картин для различных типов кристаллических структур песка SiO_2 .

В в е д е н и е

В настоящее время при производстве строительных материалов требования к их качеству, энергосбережению, надежности и долговечности достаточно высоки. Поэтому эффективное использование на практике результатов физических исследований является весьма актуальным. В строительном производстве широко используется песок, входящий в состав многих строительных материалов. На основе песка изготавливаются многочисленные марки бетонов, известковые растворы, мелкоштучные элементы мощения, огнеупоры, керамическая плитка, стекла, фильтрующие среды, наполнители полимеров и т.д. Широкое использование природного песка обусловлено разнообразием его физико-химических и механических свойств, которыми обладает песок вследствие особенностей своей кристаллической структуры.

Одним из наиболее часто используемых методов для изучения кристаллического строения веществ, в том числе и песка SiO_2 , является метод порошковой рентгеновской дифрактометрии.

РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ. СПОСОБЫ ЕГО ПОЛУЧЕНИЯ

Рентгеновские лучи – один из видов электромагнитного излучения, длина волны которого составляет порядка одного ангстрема (\AA): $1 \text{\AA} = 10^{-10}$ м. В спектре электромагнитных волн область рентгеновского излучения расположена между областями γ -лучей и ультрафиолетового излучения. Рентгеновское излучение возникает при бомбардировке материала заряженными частицами с энергиями порядка 30 кэВ. В качестве частиц для бомбардировки могут быть использованы электроны, ускоренные в электрическом поле с напряжением 30 000 В. При столкновении с веществом электроны тормозятся и часть потерянной ими энергии превращается в электромагнитное излучение. Данное электромагнитное излучение имеет сплошной спектр. Практически во всех дифракционных экспериментах используется монохроматическое рентгеновское излучение. Монохроматическим называется излучение одной строго определенной длины волны.

Для получения монохроматического рентгеновского излучения поток электронов бомбардирует металлическую мишень – анод рентгеновской трубки. Чаще всего в качестве анода используют металлическую медь. Электроны, бомбардирующие медный анод, выбивают электроны с внутреннего 1s-уровня меди. Электроны с внешних энергетических уровней (2p или 3p) переходят на внутренний 1s-уровень. Выделяющаяся при этом энергия испускается в виде рентгеновского излучения (рис. 1). Согласно постулатам Бора, при таком переходе выделяемая энергия имеет строго фиксированное значение.

Характеристическим (линейчатым) рентгеновским спектром называется спектр, полученный при переходах электронов в атомах с внешних электронных уровней на внутренние.

Для меди возможны два типа излучений: K_{α} - и K_{β} - излучения. K_{α} -излучение имеет длину волны $1,5418 \text{\AA}$ и соответствует переходу электронов $2p \rightarrow 1s$. Генерация K_{β} - излучения с длиной волны $1,3922 \text{\AA}$ происходит при переходе $3p \rightarrow 1s$.

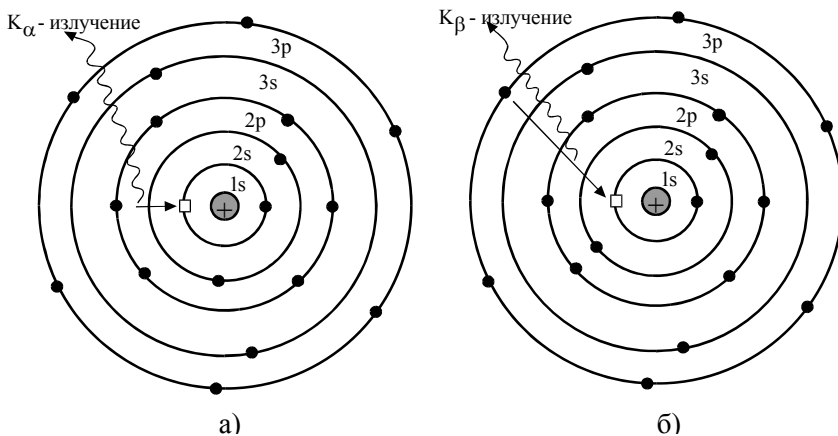


Рис. 1. Схемы возникновения CuK_α (а) и CuK_β (б) рентгеновского излучения:
 □ – свободная позиция на 1s-уровне; → – переходы электрона с 2p-уровня на 1s-уровень и с 3p-уровня на 1s-уровень

Переходы $2p \rightarrow 1s$ происходят гораздо чаще, чем переходы $3p \rightarrow 1s$, поэтому K_α -излучение является более интенсивным по сравнению с K_β -излучением. По этой причине именно K_α -излучение используется в практической рентгенографии.

2. КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Для описания внутренней структуры кристаллических твердых тел используют понятие пространственной решетки. **Пространственная решетка** – это способ представления периодического расположения атомов или ионов в пространстве.

Пространственная решетка в общем случае не совпадает с кристаллической структурой. **Кристаллическая структура** – это реальное расположение атомов данного вещества в пространстве. Кристаллическая структура является физической реальностью, а пространственная решетка – абстрактным построением, помогающим выявить симметрию кристаллической структуры.

Пространственную решетку часто называют кристаллической решеткой.

В основе пространственной решетки лежит **элементарная ячейка**, представляющая собой параллелепипед с характерным для данной кристаллической структуры расположением атомов (рис. 2). Если взять большое число одинаковых элементарных ячеек и вплотную уложить их в определенном объеме, сохраняя параллельность ребер и граней, то получится пример структуры идеального монокристалла.

Параметры решетки называются величины длин ребер **a**, **b** и **c** элементарной кристаллической ячейки. Единицей измерения параметров решетки является ангстрем. Параметры решетки **a**, **b**, **c** и углы между ребрами α , β , γ однозначно определяют элементарную ячейку.

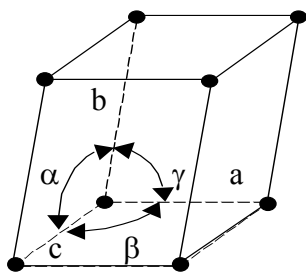


Рис.2. Элементарная ячейка

В 1848 г. французский кристаллограф О.Браве показал, что в зависимости от соотношения величины параметров решетки и взаимной ориентации ребер элементарной ячейки может существовать *14 типов* элементарных кристаллических ячеек.

В зависимости от расположения атомов элементарные кристаллические ячейки делятся на *примитивные (простые), базоцентрированные, объемноцентрированные и гранецентрированные* (рис. 3).

Примитивной называется ячейка, в которой атомы расположены только в вершинах параллелепипеда (рис. 3,а). Примитивная элементарная ячейка обозначается символом Р.

Элементарная ячейка называется *гранецентрированной*, если кроме атомов в вершинах в центре каждой из шести граней параллелепипеда расположено по одному атому (рис. 3,б). Гранецентрированная ячейка обозначается символом F.

Базоцентрированной называется элементарная ячейка, в которой кроме атомов в вершинах имеются атомы в центре оснований параллелепипеда (рис. 3, в). Базоцентрированная элементарная ячейка обозначается символом С.

Объемоцентрированной называется элементарная ячейка, в которой кроме атомов в вершинах расположен атом в месте пересечения пространственных диагоналей параллелепипеда (рис. 3, г). Объемоцентрированная элементарная ячейка обозначается символом I.

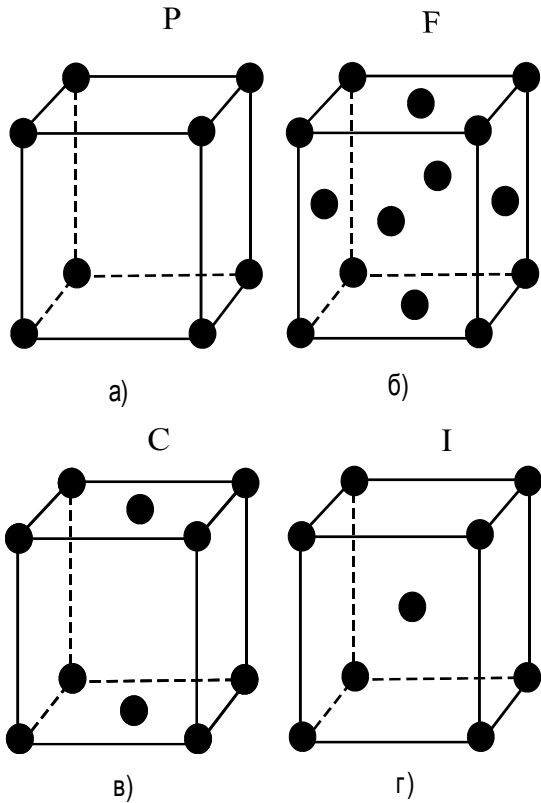


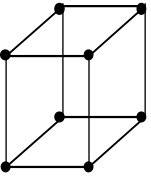
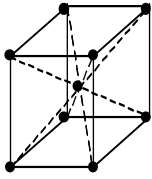
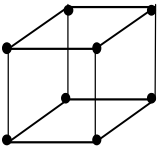
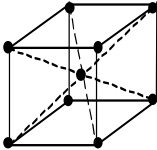
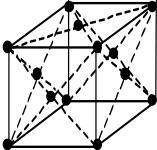
Рис.3. Прimitивная (а), гранецентрированная (б), базоцентрированная (в) и объемоцентрированная (г) элементарные ячейки

В зависимости от формы элементарной ячейки, углов между ее гранями α , β , γ (рис. 2) и соотношения между величинами параметров решетки a , b , c различают **семь кристаллических систем** или **сингоний** (кубическая, гексагональная, тетрагональная, тригональная, ромбическая, моноклинная, триклинная), включающих 14 элементарных кристаллических ячеек.

В данной работе будут рассмотрены порошкообразные монокристаллические пески SiO_2 , имеющие *тетрагональную и кубическую* сингонии. Типы элементарных ячеек этих сингоний представлены в табл. 1.

Таблица 1

Элементарные ячейки тетрагональной
и кубической сингоний

Сингония	Тип элементарной ячейки			
	примитивная (P)	базоцентрированная (C)	объемноцентрированная (I)	гранецентрированная (F)
тетрагональная				
кубическая				

Тетрагональная сингония. $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. В данном случае элементарная ячейка имеет форму прямой призмы с квадратным основанием. В этой сингонии существует два варианта элементарных ячеек: простая и объемноцентрированная.

Кубическая сингония. $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Элементарная ячейка имеет форму куба. В данной сингонии существует три варианта элементарных ячеек: примитивная, объемноцентрированная, гранецентрированная.

3. ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ НА КРИСТАЛЛАХ

Рентгеновское излучение имеет длину волны сравнимую с величиной расстояния между атомами. Поэтому при попадании рентгеновского излучения на кристаллическое вещество

возникает дифракционная картина. В этом случае кристалл можно рассматривать как дифракционную решетку. Описание дифракции рентгеновских лучей на кристаллической решетке основывается на **законе Вульфа-Брэгга**.

Рассмотрим дифракцию рентгеновских лучей 1 и 2 на двух параллельных атомных плоскостях А и В кристалла. Лучи 1 и 2 частично отражаются от плоскости А, а также частично проходят через нее и отражаются от плоскости В в соответствии с законами отражения (рис. 4).

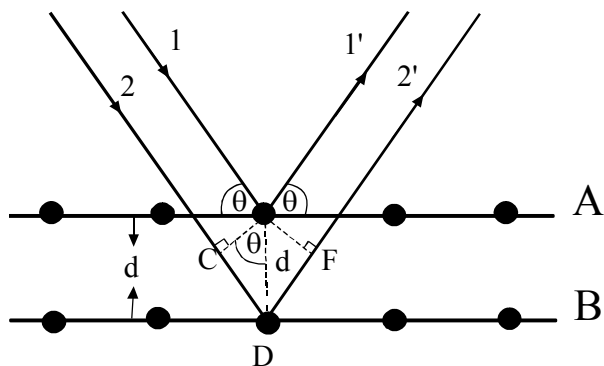


Рис. 4. К выводу закона Вульфа-Брэгга для дифракции рентгеновских лучей

Запишем условие, при котором отраженные лучи 1' и 2' распространяются в одной фазе. Луч 2-2' по сравнению с лучом 1-1' проходит дополнительный путь $\Delta = CD + DF$. Чтобы лучи 1' и 2' были в одной фазе, разность хода Δ должна быть равна целому числу длин волн:

$$\Delta = n\lambda, \quad (1)$$

где λ – длина волны рентгеновского излучения;
 n – порядок спектра ($n = 0, 1, 2, \dots$).

Расстояние между парой соседних параллельных плоскостей называется *межплоскостным расстоянием* d , а угол θ – *брэгговским углом дифракции* (рис. 4).

Тогда

$$CD = DF = d \sin \theta, \quad \Delta = 2 d \sin \theta. \quad (2)$$

Из условий (1) – (2) получаем выражение **закона Вульфа-Брэгга для дифракции рентгеновских лучей на кристаллической решетке:**

$$2d \sin \theta = n\lambda. \quad (3)$$

В твердом теле всегда существует множество плоскостей, на которых происходит дифракция рентгеновских лучей. В том случае, когда закон Вульфа-Брэгга выполняется, отраженные лучи распространяются в одной фазе, и их интерференция приводит к появлению максимумов (пиков) интенсивности на дифракционной картине (рис. 5). Если углы падения рентгеновских лучей отличаются от брэгговского угла θ , то отраженные лучи распространяются в противофазе и гасят друг друга. Им отвечают дифракционные минимумы, интенсивность которых близка к нулю.

4. МЕТОД ПОРОШКОВОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

Дифракция рентгеновского излучения наблюдается как для сплошных твердых тел, так и для веществ, существующих в виде порошков. К таким веществам относятся, например, песок, сахар, соль и т.п. Порошок представляет собой поликристаллическое вещество, состоящее из множества отдельных, беспорядочно ориентированных, мелких кристалликов. Дифракционные картины порошков по своей форме имеют такой же вид, как и для сплошных твердых тел (рис. 5).

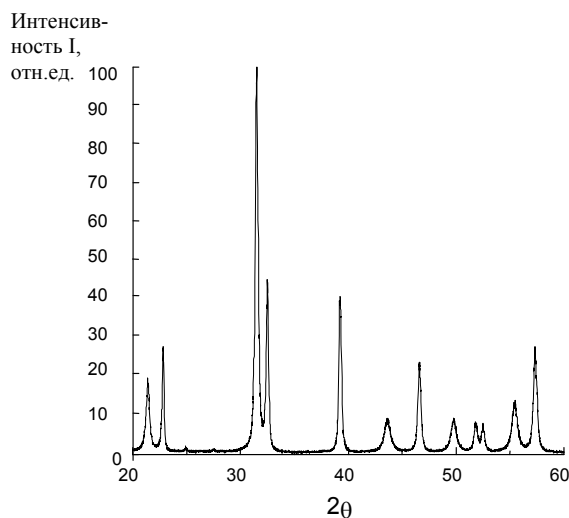


Рис. 5. Общий вид дифракционной картины (рентгенограммы)

Для каждого конкретного вещества положение дифракционных линий на рентгенограмме строго фиксировано и, подобно отпечаткам пальцев человека, характерно только этому веществу. Каждое вещество имеет индивидуальную, лишь ему присущую порошковую рентгенограмму, по которой его можно распознать среди других веществ. Рентгенограммы химических соединений собраны в картотеке рентгенограмм, которая известна теперь как картотека JC PDC, а ранее как ASTM. Картотеку JC PDC можно найти в Интернете по адресу: <http://barns.ill.fr/dif/icsd>.

Рентгенограмма – совокупность дифракционных пиков различной интенсивности, расположенных при соответствующих дифракционных углах (рис.5). Часто рентгенограммы изображаются упрощенно в виде так называемых **штрих-диаграмм**, представляющих собой набор линий, расположение которых определяется дифракционным углом 2θ , а высота равна значениям интенсивностей дифракционных пиков в относительных единицах. Пример штрих-диаграммы представлен на рис. 6.

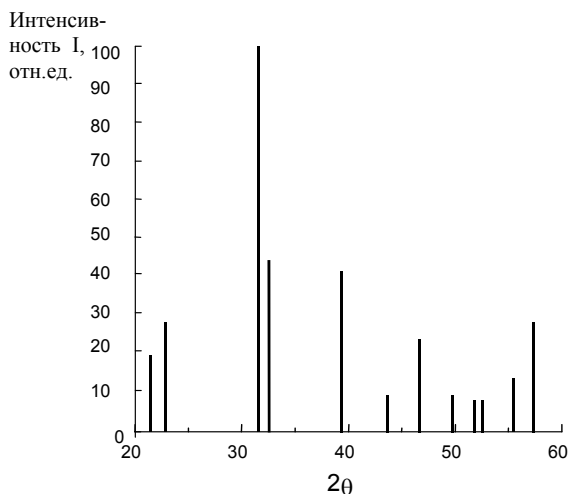


Рис.6. Вид штрих-диаграммы для порошковых веществ

Пересчет интенсивности линий на штрих-диаграмме в относительные единицы производится следующим образом. Самая интенсивная линия принимается равной 100 отн.ед., а все остальные линии рассчитываются в соответствующих долях относительно нее.

В природе кристаллические твердые вещества встречаются в большинстве случаев в виде поликристаллов, поэтому при их изучении рентгенографические методы исследования, в частности, метод порошковой дифрактометрии, имеют большое значение. В настоящее время благодаря прогрессу в компьютерной технике порошковая дифрактометрия является одним из наиболее используемых методов исследований как в физике твердого тела, так и в материаловедении.

Анализ экспериментальной дифракционной картины (рентгенограммы), полученной от порошкообразного образца (рис.5), позволяет определить координаты пространственного расположения атомов в элементарной ячейке, заселенности

атомами своих позиций, параметры и объем элементарной ячейки, присутствие примесей, наличие фаз и т.д.

Теоретическое определение интенсивностей рентгеновских пиков имеет две цели. Во-первых, количественное вычисление интенсивностей необходимо для определения неизвестных кристаллических структур. Во-вторых, количественные данные по интенсивности используют для распознавания веществ по справочным данным из картотеки JC PDC.

Порошковые рентгенограммы можно получить с помощью рентгеновского дифрактометра.

5. ПРИНЦИП ДЕЙСТВИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ДИФРАКТОМЕТРА

Для получения рентгенограмм монокристаллов и поликристаллических порошкообразных веществ используется рентгеновский дифрактометр общего назначения (ДРОН-3, ДРОН-4 и т.д.). Основные элементы рентгеновского дифрактометра типа ДРОН представлены на рис. 7. Рентгеновское излучение получают при помощи рентгеновской трубки, в которой откачан воздух до вакуума порядка 10^{-5} - 10^{-6} мм рт. ст. Катод трубки – вольфрамовая нить накала, расположенная на расстоянии 5 – 10 мм от анода.

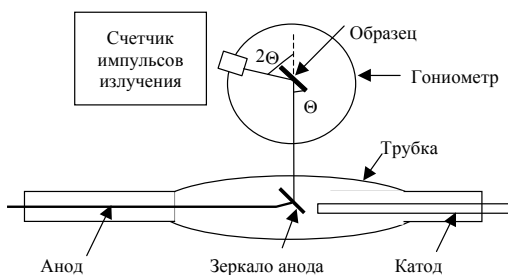


Рис. 7. Схема рентгеновского дифрактометра общего назначения

В результате термоэлектронной эмиссии электроны вылетают из катода и образуют вокруг нити накала «электронное облако». Под действием высокого напряжения электроны движутся к аноду и на его поверхности тормозятся. При этом их кинетическая энергия переходит в тепловую энергию и энергию рентгеновского излучения. Тепловая энергия может разогревать анод, поэтому анод изготавливают из материалов с низкой теплоемкостью, например, меди или стали, и охлаждают проточной водой.

Рентгеновское излучение зеркалом анода, представляющим собой металлическую пластинку, направляется на порошок исследуемого вещества, запрессованный в специальную кювету, расположенную на круге гониометра. Вращение образца вокруг оси приводит к тому, что различные плоскости поликристалла последовательно попадают в положения, удовлетворяющие условию дифракции Вульфа-Брегга.

Интенсивность рентгеновских лучей, испытавших дифракцию и попавших в счетчик, определяет «высоту» пика дифракционной линии (рис.5).

Усиленный и преобразованный импульс рентгеновского излучения регистрируется специальными устройствами (самописец, компьютер) в виде зависимости интенсивности дифракционных линий от угла отражения 2θ (рис.5).

6. ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ЛИНИЙ НА РЕНТГЕНОГРАММАХ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ПОРОШКА

Целью теоретического расчета рентгенограмм является определение двух характеристик:

- 1) межплоскостных расстояний d ;
- 2) интенсивностей дифракционных пиков.

Межплоскостные расстояния определяются из условия Вульфа-Брегга (3). Вычисление величины интенсивности пиков представляет собой более сложную задачу.

Относительной интенсивностью линии называется высота ее пика, отнесенная к высоте самой большой линии, принятой за 100 отн.ед. Интенсивность линий зависит от ряда факторов: от условий съемки, типа атомов в элементарной ячейке, характера их расположения в кристаллической решетке, рассеяния излучения на атомах, поглощения излучения веществом и тепловых колебаний атомов в решетке.

Пренебрегая поглощением излучения веществом и тепловыми колебаниями атомов в решетке, относительная интенсивность пика в методе порошка вычисляется по формуле

$$I_{\text{отн}} = \text{PLG} \rho |F|^2, \quad (4)$$

где $\text{PLG} = \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta}$ – *угловой множитель*, который учитывает

зависимость интенсивности рассеяния рентгеновского излучения от угла дифракции θ . Угловой множитель PLG плавно меняется при изменении угла дифракции и не зависит от кристаллической структуры вещества.

Каждая линия на рентгенограмме порождается не одной плоскостью, а целым рядом плоскостей, которые характеризуются одинаковым межплоскостным расстоянием d . Пики от этих плоскостей расположены при одних и тех же углах, поэтому накладываются друг на друга. Число плоскостей кристалла, принимающих участие в создании данного дифракционного пика, в формуле (4) характеризуется *множителем повторяемости* p .

От расположения атомов в элементарной ячейке и от их количества, т.е. от кристаллической структуры кристалла зависит только величина *структурной амплитуды* F . Физический смысл структурной амплитуды F заключается в том, что ее модуль численно равен амплитуде волны, рассеянной одной элементарной ячейкой в направлении определенной плоскости. Структурная амплитуда вычисляется как

$$F = \sum_j f_j \cos 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j), \quad (5)$$

где f_j – атомная функция рассеяния для j -го атома;

x, y, z – координаты атомов. Атомная функция рассеяния f_j пропорциональна числу электронов в атоме. Значения атомной функции рассеяния определены для атомов всех химических элементов и приведены в справочниках по рентгенографическому анализу.

Суммирование в (5) ведется по всем атомам элементарной ячейки. Если атом не находится в своей позиции, значит имеется вакансия, что приводит к изменению значения структурной амплитуды F . Заполнение атомами своих позиций в элементарной ячейке называется **заселенностью** и обозначается буквой **m** . Если все позиции элементарной ячейки заполнены атомами, то заселенность равна единице.

Формула (5) для вычисления структурной амплитуды универсальна и используется для любых типов элементарных ячеек.

В настоящее время разработаны компьютерные программы для расчета рентгеновских спектров большого числа соединений. В данной лабораторной работе теоретический расчет рентгеновских дифракционных картин по формулам (4)-(5) для различных типов кристаллических структур песка SiO_2 производится компьютерным методом.

7. ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ ПЕСКА

В строительной индустрии ежегодно добываются миллионы тонн песка. Песок по химическому составу представляет собой двуокись кремния SiO_2 . Песок второй по распространению оксид земной коры. В этом отношении он уступает только воде. Двуокись кремния (другое название этого вещества – кремнезем) существует в десяти различных модификациях (табл. 2).

Таблица 2

Типы кристаллических структур и физические свойства SiO₂

Модификации SiO ₂	Сингония	Физические свойства			
		плотность, кг/м ³	показатели преломления		теплоемкость, C _p , Дж/(моль·К)
			наименьший	наибольший	
β-кристобалит	кубическая	2230	1,484	1,487	44,60
β-тридимит	гексагональная	2260	1,469	1,473	–
α-кварц	гексагональная	2530	1,53	1,54	–
β-кварц	тригональная	2655	1,544	1,553	44,60
β ₁ -тридимит	гексагональная	2260	1,469	1,473	–
α-тридимит	ромбическая	2300	1,469	1,473	–
α-кристобалит	тетрагональная	2330	–	–	–
коэсит	моноклинная	3010	1,599	1,604	45,39
стишовит	тетрагональная	4350	1,799	1,826	42,97
китит	тетрагональная	2500	1,513	1,522	–

Все разновидности песка, представленные в табл.2, описываются одной и той же химической формулой, но отличаются друг от друга различным типом кристаллических решеток. Например, если песок имеет кубический тип решетки, то он

называется β -кристобалитом. Если тип решетки гексагональный – α -кварцом, тетрагональный – стишовитом и т.д.

Из табл.2 следует, что кремнезем SiO_2 с конкретным типом кристаллической структуры обладает присущими только ему определенными физико-химическими свойствами. Например, твердость песка с ромбической структурой (α -тридимит) составляет 5,5 единиц по минералогической шкале. Твердость α -тридимита меньше твердости песка с гексагональной структурой (α -кварц), которая равна 7 единицам. Стишовит с тетрагональной структурой имеет самую высокую твердость из всех модификаций песка (8-8,5 единиц). По твердости стишовит значительно превосходит корунд и относится наряду с алмазом к сверхтвердым материалам.

В производстве строительных материалов, керамической плитки, стекла и т.д. в основном используется кристаллографическая модификация песка α - кварц. Разработка различных месторождений песка требует решения следующих важных задач. Необходимо определить основную кристаллическую модификацию песка, присутствующую в данном месторождении, а также наличие других кристаллографических разновидностей песка и их количество. Решение данных задач может быть выполнено при помощи метода рентгенографической порошковой дифрактометрии. Для определения преобладающей модификации песка в данном песчаном месторождении необходимо рассчитать теоретическую штрих-диаграмму для песка с различной кристаллической структурой и сравнить ее с экспериментальной. Такие исследования позволят определить область использования песка данного месторождения.

В случае, если метод порошковой дифрактометрии покажет, что песок содержит преимущественно α - кварц, то такой песок может быть использован не только в строительной индустрии, но для изготовления линз для ультрафиолетовой оптики, пластинок для вращения плоскости поляризации, призм для спектрографов. α - кварцевый песок обладает пьезоэлектрическими

свойствами и анизотропией относительной диэлектрической проницаемости, поэтому широко используется в радиоэлектронике.

Другие разновидности песка, например, пески ромбической (α -тридимит) и тетрагональной (α -кристобалит) структуры, являются одной из составных частей агатов, халцедонов, опалов.

Таким образом, все модификации песка имеют одну и ту же химическую формулу, но различаются по своей кристаллической структуре. Поэтому физические свойства песков являются весьма многообразными. Это и определяет широкую сферу использования песков в практической деятельности.

8. ЗАДАНИЕ К ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ

Теоретический расчет интенсивностей дифракционных пиков и межплоскостных расстояний, построение штрих-диаграмм и элементарных ячеек производится с помощью компьютерной программы **Cell.exe**.

Задание 1

Для SiO_2 (β -кристобалит) **кубической** сингонии по заданным параметрам **примитивной** кристаллической ячейки $a = 13,402 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ вычислите межплоскостные расстояния и относительные интенсивности дифракционных пиков и занесите в табл. 3. По полученным данным постройте штрих-диаграмму и нарисуйте элементарную ячейку с расположенными в ней атомами. Штрих-диаграмму и рисунок элементарной ячейки представьте в отчете.

Таблица 3

Межплоскостные расстояния и интенсивности
дифракционных пиков для β -кристобалита

№ п.п.	Угол 2θ	Межплоскостное расстояние d , \AA	Относительная интенсивность I , отн.ед.

В табл. 4 приведены данные, которые необходимы для расчета интенсивностей дифракционных пиков и изображения элементарной кристаллической ячейки β -кristобалита.

Таблица 4

Характеристики примитивной элементарной кристаллической ячейки β -кristобалита

№ п.п.	Атом N	Валентность A	Заселенность m	Тепловой фактор B_t	Координаты		
					x	y	z
1	Si	0	1	0	0	0	0
2	O	0	1	0	0	0	0.5

Задание 2

Вычислите межплоскостные расстояния и относительные интенсивности дифракционных пиков для модификации SiO_2 **стишовит** с **примитивной** кристаллической ячейкой **тетрагональной** сингонии и запишите в табл. 5. Параметры решетки и углы между ребрами элементарной ячейки равны: $a = b = 4,1772 \text{ \AA}$, $c = 2,6651 \text{ \AA}$ и $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. По полученным данным постройте штрих-диаграмму и нарисуйте элементарную ячейку с расположенными в ней атомами. Рисунки штрих-диаграммы и элементарной ячейки представьте в отчете.

Таблица 5

Межплоскостные расстояния и интенсивности дифракционных пиков для стишовита

№ п.п.	Угол 2θ	Межплоскостное расстояние d , \AA	Относительная интенсивность I, отн.ед.

В табл.6 приведены данные, которые необходимы для расчета интенсивностей дифракционных пиков и изображения элементарной кристаллической ячейки стишовита.

Таблица 6

Характеристики примитивной элементарной кристаллической ячейки стишовита

№ п.п.	Атом N	Валентность A	Заселенность m	Тепловой фактор V_t	Координаты		
					x	y	z
1	Si	0	1	0	0	0	0
2	O	0	1	0	0,3062	0,3062	0

Задание 3

Проведите сравнительный анализ штрих-диаграмм для кубической и тетрагональной кристаллических структур песка SiO_2 и сделайте вывод.

Пример вывода: Изучены основные закономерности дифракции рентгеновских лучей в кристаллах. Используя метод рентгеновской дифрактометрии, рассчитаны штрих-диаграммы для SiO_2 с кубической и тетрагональной элементарными ячейками. Сравнительный анализ полученных штрих-диаграмм показал, что число дифракционных линий для кубической структуры песка меньше, чем для песка с тетрагональной элементарной ячейкой.

Контрольные вопросы

1. Какое излучение называется монохроматическим?
2. Что называется характеристическим рентгеновским спектром?

3. Объясните принцип возникновения монохроматического K_{α} -излучения.
4. Дайте определения примитивной, гранецентрированной, базоцентрированной и объемцентрированной элементарных ячеек.
5. Какое физическое явление лежит в основе рентгеноструктурного анализа?
6. Выведите закон Вульфа-Брэгга.
7. Что представляет собой рентгенограмма и ее штрих-диаграмма?
8. Объясните принцип действия рентгеновского дифрактометра.
9. Что называется относительной интенсивностью линии? От каких факторов зависит интенсивность линии?
10. По какой формуле вычисляется относительная интенсивность линии в методе порошка? От чего зависят угловой множитель и множитель повторяемости?
11. Сформулируйте физический смысл структурной амплитуды.
12. Чем определяется многообразие свойств песка SiO_2 ?

Литература

1. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. – М., 2000.
2. Физика конденсированных сред / П.Г. Кужир, А.А. Баранов, А.П. Каравай, Н.П. Юркевич. – Мн., 2002.
3. Кристаллография и электронная микроскопия / Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков, А.Н. Иванов, А.Н. Расторгуев. – М., 1982.

Учебное издание

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПЕСКА МЕТОДОМ
РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

Методические указания к лабораторной работе

Составители: КУЖИР Павел Григорьевич
САВЧУК Галина Казимировна
ЮРКЕВИЧ Наталья Петровна

Редактор А.М. Кондратович

Компьютерная верстка Е.А. Занкевич

Подписано в печать 22.02.2005.

Формат 60x84 1/16. Бумага типографская № 2.

Печать офсетная. Гарнитура Таймс.

Усл. печ. л. 1,3. Уч.-изд. л. 1,0. Тираж 100. Заказ 456.

Издатель и полиграфическое исполнение:

Белорусский национальный технический университет.

Лицензия № 02330/0056957 от 01.04.2004.

220013, Минск, проспект Ф.Скорины, 65.