

Вопросы к зачету по курсу «Рентгеновская дифракция».

1. Кристалл как высокосимметричная система. Операции симметрии для кристаллов, сингонии, пространственные группы.
2. Рентгеновское излучение (РИ) и его взаимодействие с веществом. Томсоновское и комптоновское рассеяние, фотоэффект.
3. Понятие дифракции РИ. Взаимосвязь амплитуды рассеянного излучения с электронной плотностью системы-рассеивателя.
4. Закон Брегга-Вульфа в векторной и скалярной формах. Трансляционная симметрия и ее влияние на характер дифракции РИ. Сфера Эвальда.
5. Взаимосвязь симметрии в прямом и обратном пространстве. Закон Фриделя. Лауэ-класс кристалла. Понятие о систематических погасаниях.
6. Кинематическая теория дифракции. Дифракция на кристалле как на системе атомов. Структурная амплитуда.
7. Заселенность, параметры атомного смещения. Аномальное рассеяние.
8. Дифракция на поликристаллическом образце. Формирование порошковой дифрактограммы.
9. Теоретическая дифрактограмма. Фактор повторяемости. LPG-фактор.
10. Основные геометрии съемки в порошковой дифракции. Источники РИ, основные типы точечных и координатных детекторов РИ. Выбор условий эксперимента, подготовка проб.
11. Профильный анализ как вариационная задача. Основные виды профильных функций. Зависимость Кальотти. Методы описания фона. Нелинейный МНК.
12. Качественный рентгенофазовый анализ. Основные принципы, базы данных ICDD.
13. Индексирование порошковых дифрактограмм. Автоматическое и ручное индексирование, уточнение параметров ячейки (МНК).
14. Структурный тип перовскита. Метод гомологии. Матрица перехода, расщепление рефлексов. Сверхструктурные рефлекссы.
15. Решение структур по порошковым дифракционным данным.
16. Метод Ритвельда. Математические основы. Порядок уточнения отдельных переменных. Метод ЛеБея, метод Паули.
17. Текстура. Методы описания текстуры образцов, причины текстурирования.
18. Влияние микроструктуры образца на вид дифрактограммы. Малость ОКР. Микронапряжения. Методы определения размеров ОКР и концентрации микронапряжений.
19. Количественный рентгенофазовый анализ.
20. Дифракция на тонких пленках. Рентгеновская рефлектометрия.
21. Малоугловое рассеяние рентгеновских лучей.
22. Понятие об электронной дифракции и электронной микроскопии высокого разрешения.