

## Примерный вариант второй контрольной работы для ФНМ-2014.

1. Соединение  $GdFeO_3$  обладает искаженной структурой перовскита, матрица перехода от ячейки

перовскита  $\begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{vmatrix}$ , пространственная группа  $Pnma$ . На какое количество рефлексов расщепятся

рефлексы (100) и (110) субъячейки? Какие индексы будут у этих рефлексов?

2. При каком  $x$  интенсивность рефлекса (111) на дифрактограмме твердого раствора  $Na_{1-x}K_xCl$  станет нулевой? Параметры атомного смещения считайте нулевыми для всех атомов, также для всех атомов

считайте  $F_{atom} = Z_{atom} e^{-\frac{\sin \theta}{\lambda}}$ , где показатель экспоненты – в  $[\text{Å}^{-1}]$ .

3. После исследования дифрактограммы образца горной породы было обнаружено, что в смеси присутствует кальцит  $CaCO_3$ ,  $\alpha$ -кварц и доломит ( $CaMg(CO_3)_2$ ). Интегральные интенсивности максимальных (100%) рефлексов данных фаз составляют 1024.00  $\text{имп} \times 2\theta$  (рефлекс 104 кальцита), 3491.84  $\text{имп} \times 2\theta$  (рефлекс 101  $SiO_2$ ), 657.92  $\text{имп} \times 2\theta$  (рефлекс 104 доломита). После того, как к 1 г образца добавили 0.5 г чистого кристаллического  $\alpha$ -кварца, интенсивности рефлексов составили 550.00, 3751.00 и 353.38  $\text{имп} \times 2\theta$ , соответственно. Рассчитайте абсолютные содержания кристаллических фаз в образце, определите массовую долю аморфной фазы. Корундовые числа кальцита, кварца и доломита равны 2.00, 3.41 и 2.57, соответственно.

4. Рефлекс (101) нанопорошка анатаза (Пр. гр.  $I4_1/amd$ ,  $a = 3.7852 \text{ Å}$ ,  $c = 9.5139 \text{ Å}$ ) по результатам профильного анализа хорошо аппроксимируется функцией Лоренца и имеет полуширину  $0.5668^\circ$ . Считая инструментальный вклад нулевым, рассчитайте эффективный размер ОКР. Съемка проводилась на излучении  $Cu K\alpha_1$ .

5. По приведенным данным дифрактограмму кубического соединения, по систематическим погасаниям рефлексов определите центрировку, наличие открытых элементов симметрии и предположите (по возможности) пространственную группу.

$d, \text{Å}$	$2\theta$	$Q$	$h$	$k$	$l$
5.5554	15.940	324.02			
4.5360	19.555	486.03			
3.2074	27.792	972.05			
2.9695	30.070	1134.06			
2.7777	32.200	1296.07			
2.6188	34.212	1458.08			
2.4845	36.124	1620.09			
2.3688	37.953	1782.10			
2.2680	39.710	1944.11			
2.1790	41.404	2106.12			
2.0285	44.634	2430.14			
1.9641	46.181	2592.14			
1.9055	47.689	2754.16			
1.8518	49.161	2916.16			
1.8024	50.602	3078.17			