

Лекционная контрольная №1. Примерный вариант.

1. Сферический монокристалл SiO_2 поворачивают по отношению к первичному пучку рентгеновского излучения. Как изменится значение μ при выводе кристалла в отражающее положение (рефлекс (101) пересек сферу Эвальда)? Считайте применимой кинематическую теорию рассеяния.
2. На рентгенограмме одной из тетрагональных форм диоксида титана - анатаза TiO_2 имеются следующие линии: 3.520 \AA (101) и 1.892 \AA (200) Определите параметры элементарной ячейки. Определите число формульных единиц на ячейку Z , если $\rho_{\text{пикн.}} = 3.8 \text{ г/см}^3$ ($M_{\text{Ti}} = 137.33$; $M_{\text{O}} = 16.0$).
3. Соединения AX и BX ($r_A > r_B$) в двойной системе AX-BX имеют неограниченные области твёрдых растворов. Как будут меняться рентгенограммы образцов при движении по диаграмме от AX к BX?
4. Тс снят на излучении Cu $K\alpha$ и Co $K\alpha_1$ ($a = 3.90 \text{ \AA}$, S.G. $Fm-3m$). Сколько линий будут присутствовать на рентгенограммах до $80^\circ 2\theta$, если $\lambda(\text{Cu } K\alpha_1) = 1.5406 \text{ \AA}$, $\lambda(\text{Cu } K\alpha_2) = 1.544 \text{ \AA}$, $\lambda(\text{Co } K\alpha_1) = 1.789 \text{ \AA}$, $\lambda(\text{Co } K\alpha_2) = 1.793 \text{ \AA}$.
5. Рассчитайте интенсивности рефлексов (100) и (111) на дифрактограмме поликристаллического образца CsCl ($a = 4.123 \text{ \AA}$, S.G. $Pm-3m$, атом цезия имеет координаты (0,0,0), хлора – (0.5, 0.5, 0.5) тепловыми колебаниями пренебрегайте, заселенность позиций единичная). Для упрощения расчетов считайте, что рассеивающие факторы атомов $F = Z e^{-\frac{\sin\theta}{\lambda}}$, показатель экспоненты в \AA^{-1} , аномальным рассеянием можно пренебречь. Съёмка проводится на излучении Cu $K\alpha_1$, $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$, геометрия «на отражение», первичный германиевый (111) монохроматор с $2\theta_M = 27.28^\circ$, степень совершенства $K = 0.5$. Считайте единичными интенсивность первичного пучка, абсорбционный фактор, текстурный фактор и фактор экстинкции.