

Запорізький національний університет



Кристалохімія.

Лекція 4.



Запоріжжя 2024.

Тема 4. Методи дослідження кристалів. Фактори, що визначають структуру кристалів

- Основи рентгеноструктурного аналізу (РСА).
- Формула Брегга-Брегга.
- Метод Лауе.
- Метод обертаючогося кристала.
- Порошковий метод Дебая–Шеррера.
- Визначення міжплощинної відстані для кристалів кубічної сингонії.

Основи рентгеноструктурного аналізу (РСА).

Рентгенівський структурний аналіз – це методи дослідження структури речовини за розподілом у просторі та інтенсивностями розсіяного на аналізованому об'єкті рентгенівського випромінювання.

$$E = h\nu \quad \nu = 1/\lambda$$

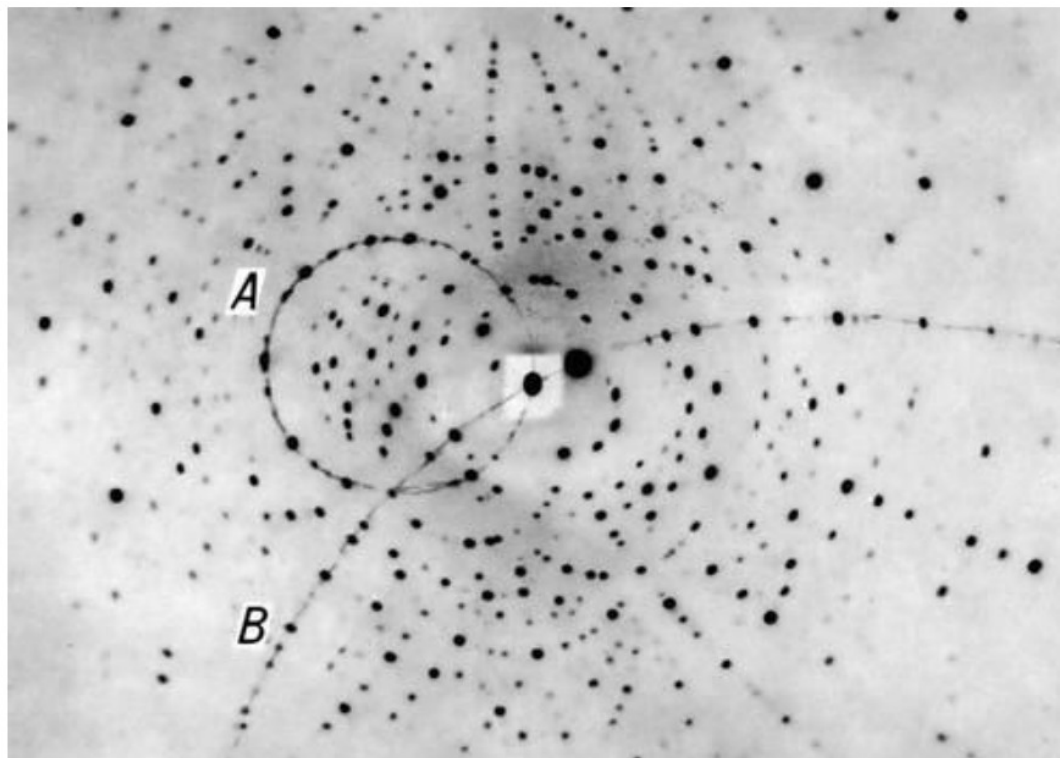
10^{-12} до 10^{-5} см

Рентгенограма – зареєстроване на світлочутливому матеріалі (фотоплівки або пластини) зображення об'єкту, що виникає у результаті взаємодії рентгенівських променів з речовиною. Про цьому можливе поглинання відображення або дифракція. Просторови розподів їх інтенсивності після кожної взаємодії іксується.

Основи рентгеноструктурного аналізу (РСА).

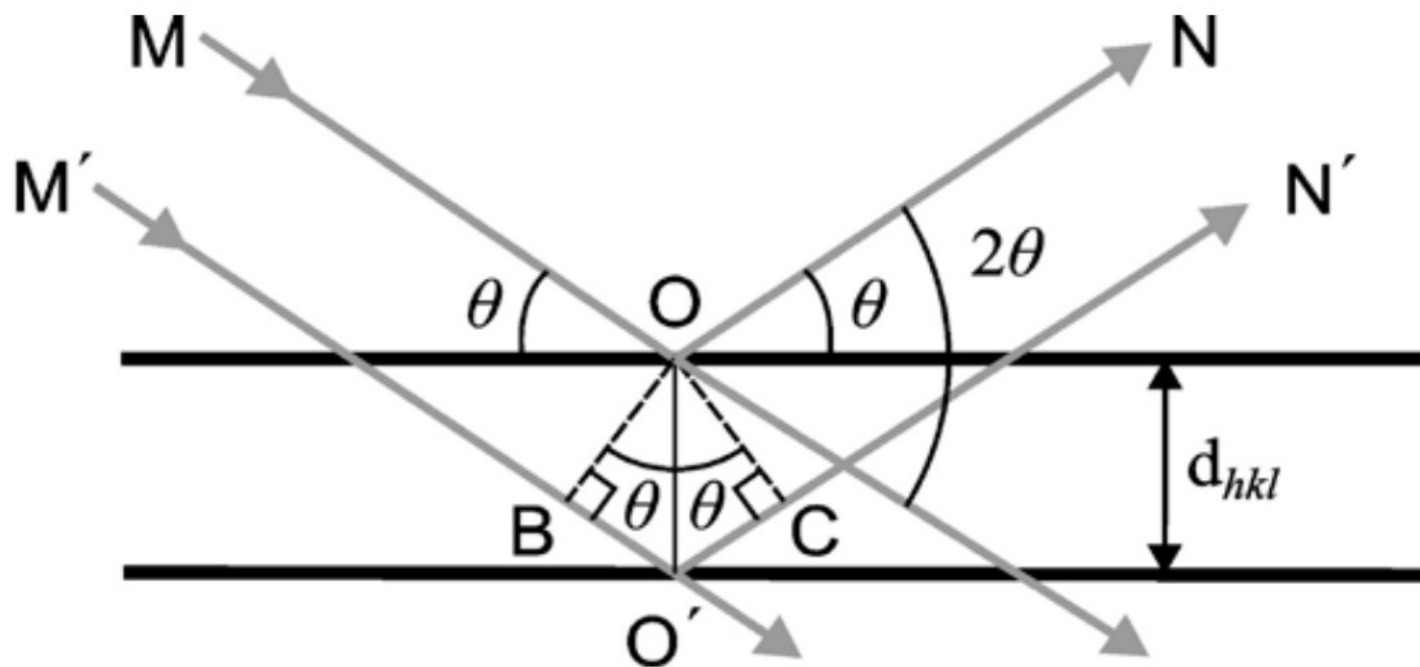
1912р.

М.Лауэ, В. Фридрих, П.Кніппінг



Лауєграма доволіно встановленого монокристалу бериллу.

Формула Брегга-Вульфа

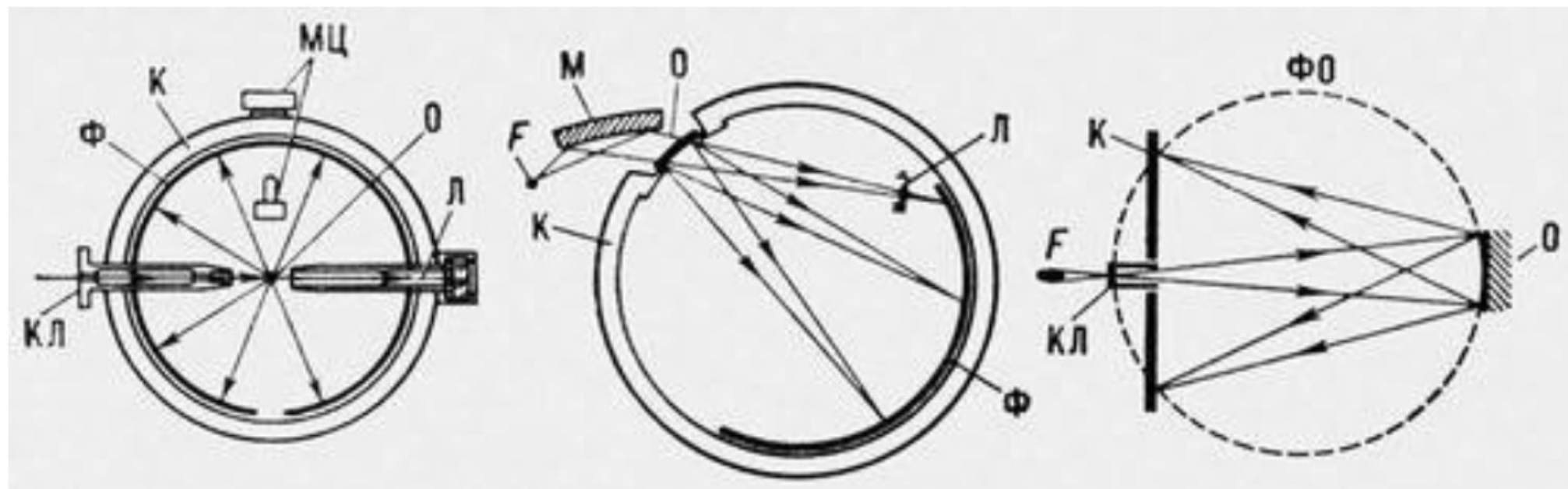


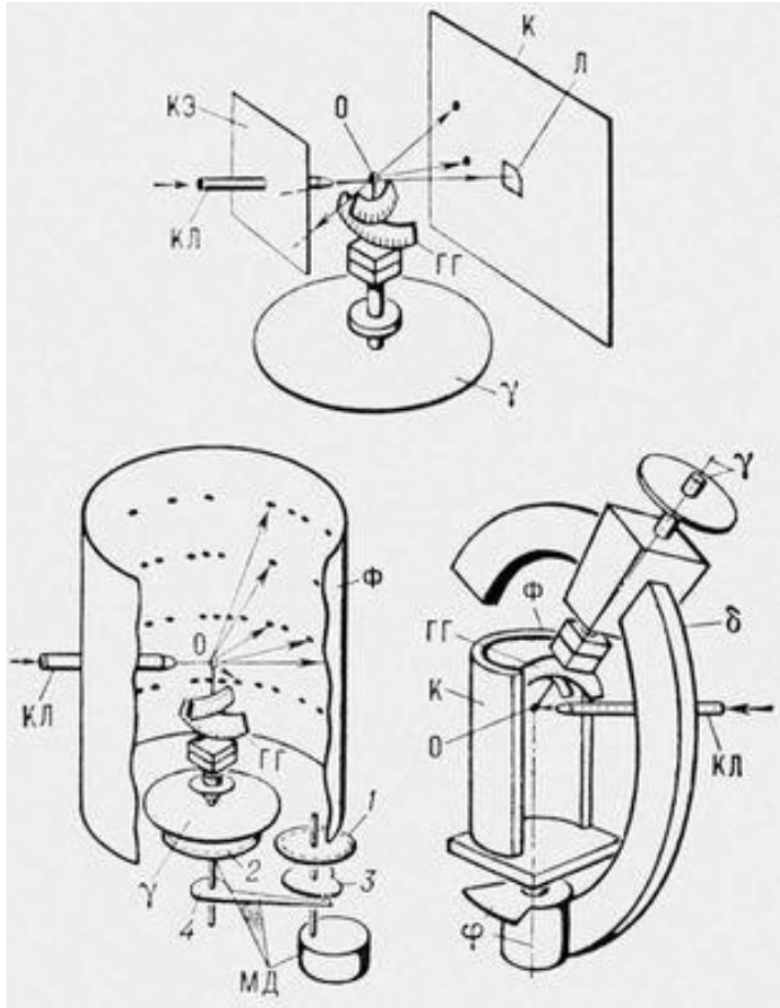
Різниця ходу лучей дорівнює.
Цілому числу довжин хвиль.
 λ -- довжина хвилі випромінення
 n -- порядок віддзеркалення

$$2d \sin \vartheta = m \lambda,$$

d – міжплощинна відстань.
 ϑ – кут

Представлення дифракції розсіюваних рентгенівських променів як відображення промінів від паралельних кристалографічних площин.
Сфера обмеження = $2/\lambda$

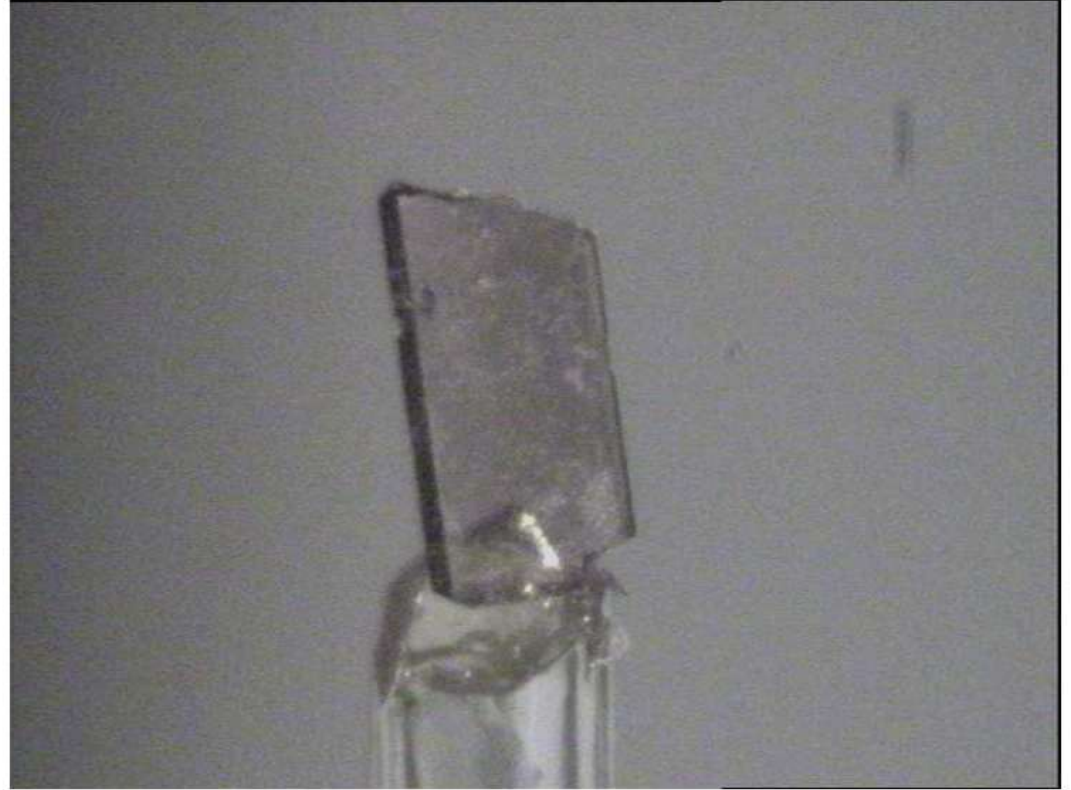


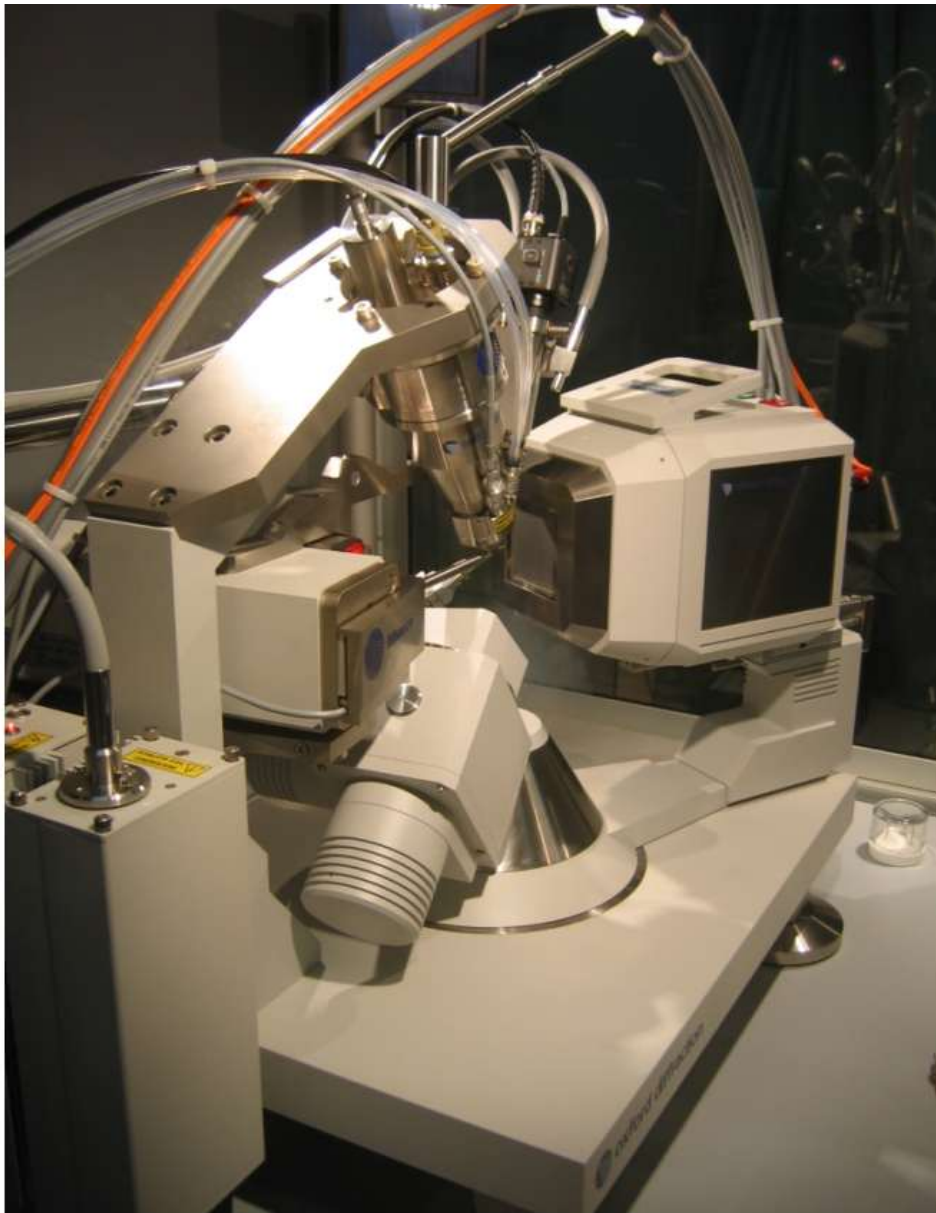


$$\rho(x, y, z) = \frac{1}{V} \sum_{\Delta hkl} F_{\Delta hkl} \exp[-2\pi i(hx + ky + lz)]$$

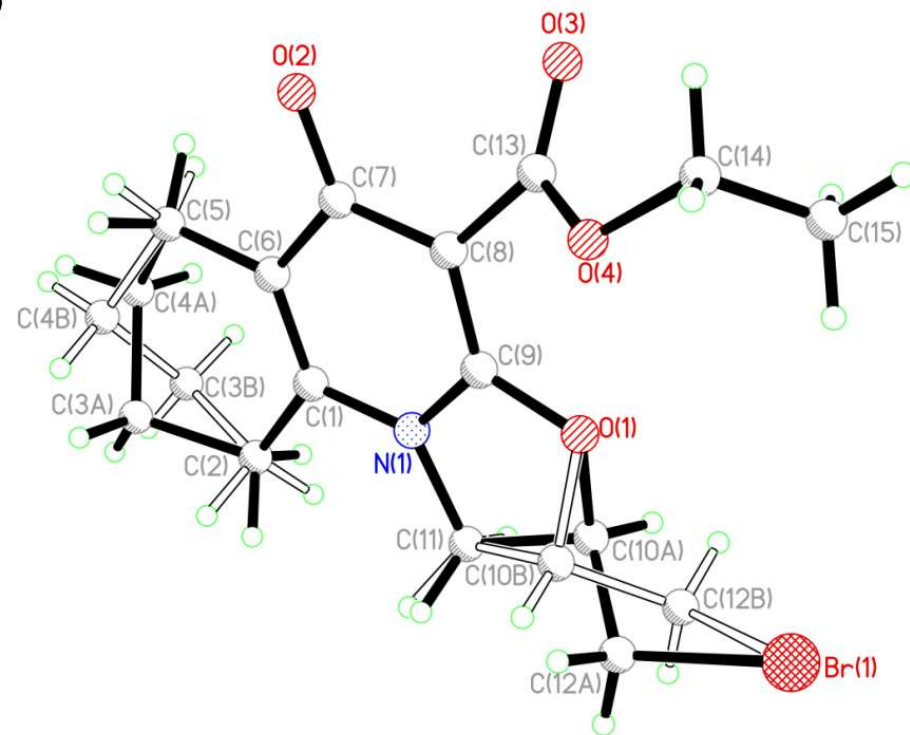
$$F_{hkl} = |F_{hkl}| (\cos \alpha_{hkl} + i \sin \alpha_{hkl}).$$

$$R = \frac{\left(\sum_{hkl} \left| |F_{hkl}|_{\text{эксн}} - |F_{hkl}|_{\text{выч}} \right| \right)}{\left(\sum_{hkl} |F_{hkl}|_{\text{эксн}} \right)}$$





Результаты РСА



Метод Лауе

$$a (\cos\alpha - \cos\alpha_0) = h\lambda,$$

$$b (\cos\beta - \cos\beta_0) = k\lambda,$$

$$c (\cos\gamma - \cos\gamma_0) = l\lambda,$$

h, k, l — Цілі числа, Міллеровські індекси

Час прокидатись та задавати питання...

