

УДК 539.26
ББК 22.37
Г 97

*Печатается по решению редакционно-издательского совета
Южного федерального университета*

Рецензенты:

*профессор кафедры физики Ростовского государственного строительного
университета, доктор физико-математических наук **Снежков В. И.**;*

*заведующий кафедрой электротехники Донского государственного
технического университета, доктор физико-математических наук,
профессор **Лаврентьев А. А.**;*

*доцент кафедры физики кристаллов и структурного анализа
Южного федерального университета, кандидат физико-
математических наук **Кофанова Н.Б.***

*Учебное пособие подготовлено и издано в рамках национального проекта
«Образование» по «Программе развития федерального государственного
образовательного учреждения высшего профессионального образования
“Южный федеральный университет” на 2007–2010 гг.»*

Гуфан А. Ю., Гуфан К. Ю.

Г 97 Применение методов теории вероятностей при интерпретации дифрактограмм
твердых растворов: учебное пособие. – Ростов н/Д: Изд-во ЮФУ, 2010. – 64 с.
ISBN 978-5-9275-0752-8

В пособии дается первое в учебной литературе изложение теоретико-вероятностного подхода к интерпретации дифрактограмм неупорядоченных и упорядочивающихся твердых растворов. Изложение материала ведется в рамках модульной технологии обучения. Все рассуждения для наглядности проводятся на примере твердых растворов окислов с относительно простой глобальной структурой перовскита. Все обобщения на другие структуры тривиальны и потому вынесены в задачи. Для облегчения усвоения материала студентами младших курсов в пособие включен модуль, содержащий необходимые общие сведения об описании и интерпретации дифрактограмм кристаллов.

Пособие адресовано широкому кругу научных работников, изучающих свойства твердых растворов, студентам, магистрантам и аспирантам, специализирующимся в области расшифровки дифрактограмм и определения структур сложных соединений их твердых растворов.

ISBN 978-5-9275-0752-8

**УДК 539.26
ББК 22.37**

© Гуфан А. Ю., Гуфан К. Ю., 2010
© Оформление. Макет. Издательство
Южного федерального университета, 2010

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ	3
Модуль 1. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ДИФРАКТОГРАММ.....	6
1.1. Дифракционные картины	6
1.2. Суперпозиция волн 1 (геометрическое и аналитическое представления)	7
1.3. Суперпозиция волн 2 (векторное представление, экспоненциальное представление)	9
1.4. Рассеяние электромагнитных волн атомами	11
1.5. Рассеяние электромагнитных волн группой атомов.....	13
1.6. Фазовая проблема рентгеноструктурного анализа	17
1.7. Паттерсоновская карта	22
1.8. Метод «тяжелого атома».....	26
1.9. Выводы.....	27
Модуль 2. УСРЕДНЕННОЕ ПО КРИСТАЛЛУ ВЛИЯНИЕ БЕСПОРЯДКА В РАСПРЕДЕЛЕНИИ АТОМОВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ВИД ДИФРАКТОГРАММ	30
2.1. Влияние теплового движения и спонтанных смещений атомов на интенсивность селективных рефлексов.....	30
2.2. Рассеяние рентгеновских лучей неупорядоченными и упорядоченными твердыми растворами.....	35
Модуль 3. ФОРМУЛИРОВКА ВЕРОЯТНОСТНЫХ МОДЕЛЕЙ ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ.....	38
3.1. Пример физической задачи, решение которой требует знания локальной структуры.	38
3.2. Вероятностная модель локальной структуры неупорядоченных твердых растворов окислов со структурой перовскита	40
3.3. Применение теоретико-вероятностного подхода для уточнения структуры $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$	49
Задания к модулю 1.....	57
Задания к модулю 2.....	59
Задания к модулю 3.....	59
Литература	60