

**ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПРОЦЕССОВ И
ЯВЛЕНИЙ, ЛЕЖАЩИЕ В ОСНОВЕ
МЕТОДОВ ПОЛУЧЕНИЯ ИНФОРМАЦИИ
О СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИКАХ
МАТЕРИАЛОВ**

Рис. 51-2. Результаты **сравнения** рентгенограмм:
 таблица сравнения межплоскостных расстояний
 Качественный фазовый анализ

Результаты анализа

Вариант | Список | **Таблица** | Графика | Усл. концентрации

Образец	1-562	1-1292	2-387	4-477	21-1272	34-180
3.5182	3.52		3.51	3.51	3.52	
3.247		3.24				3.248
2.4863		2.49				2.487
2.4291			2.43	2.435	2.431	
2.3762	2.37		2.37	2.379	2.378	
2.3302			2.33	2.336	2.332	
2.2947		2.29				2.297
2.1854		2.19				
2.0527		2.05				
1.8915			1.89	1.891	1.892	
1.6997	1.7		1.7	1.699	1.6999	
1.6653	1.66		1.66	1.665	1.6665	
1.6232		1.62				1.6239
1.4913		1.49		1.494	1.493	
1.4806	1.48			1.48	1.4808	

Печать

Список Таблица Усл. концентр.

Рис. 52. Сравнение штрихдиаграммы образца со штрихдиаграммой одного из стандартов: 21-1272, анатаз

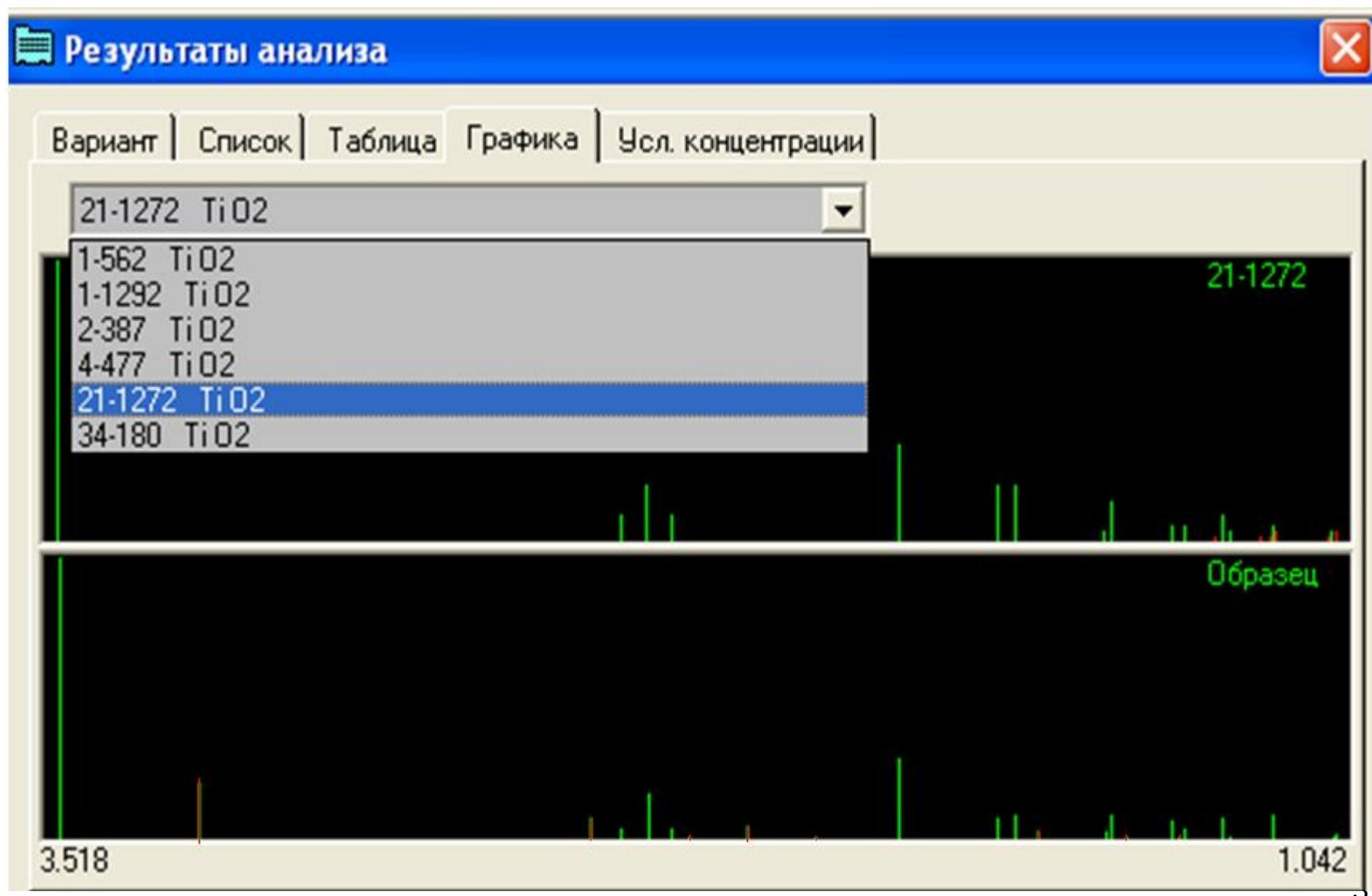


Рис. 53. Расчет концентраций компонентов и сравнение штрихдиаграмм образца и модели: 21-1272, анатаз; 1-1292, рутил.

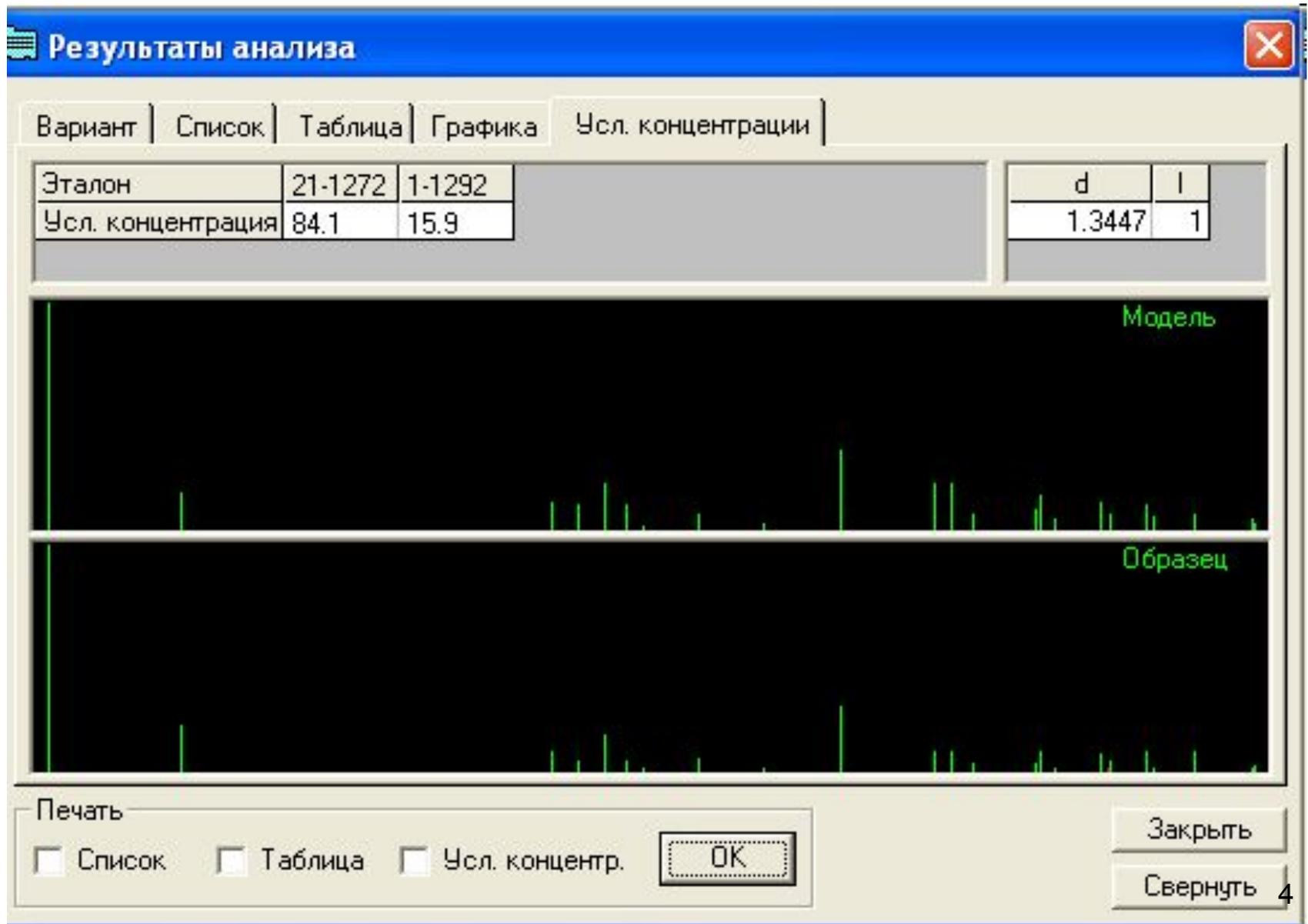
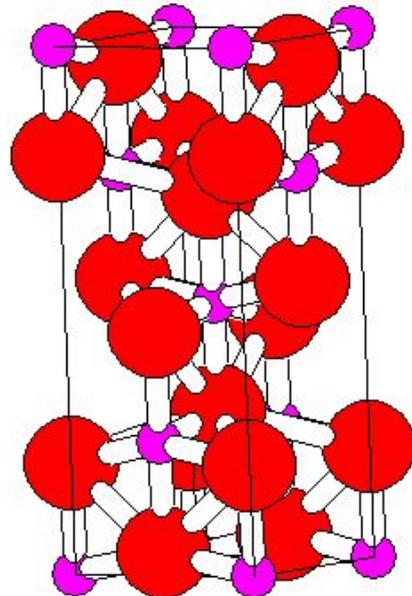
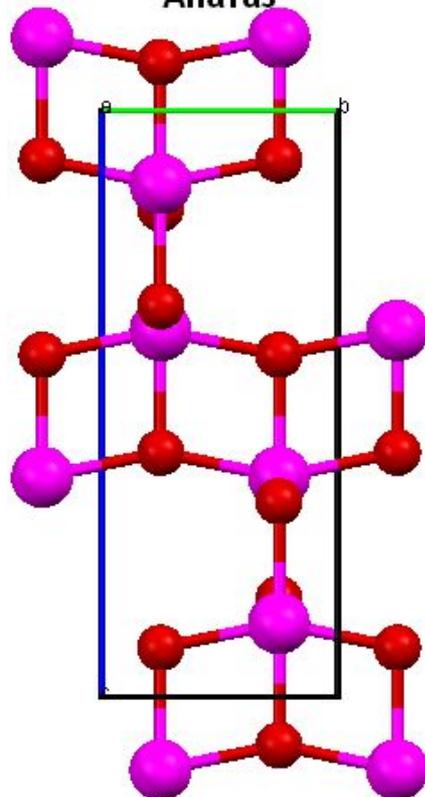


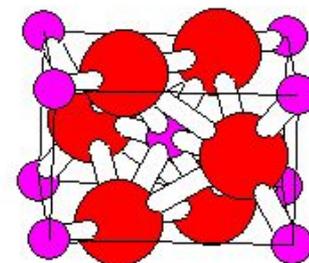
Рис. 54
Полиморфные
модификации
оксида титана



Анатаз

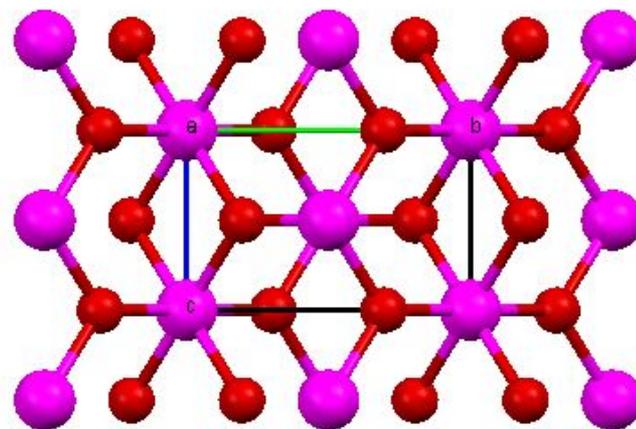


Элементарные ячейки



Рутил

Проекция на плоскость bc



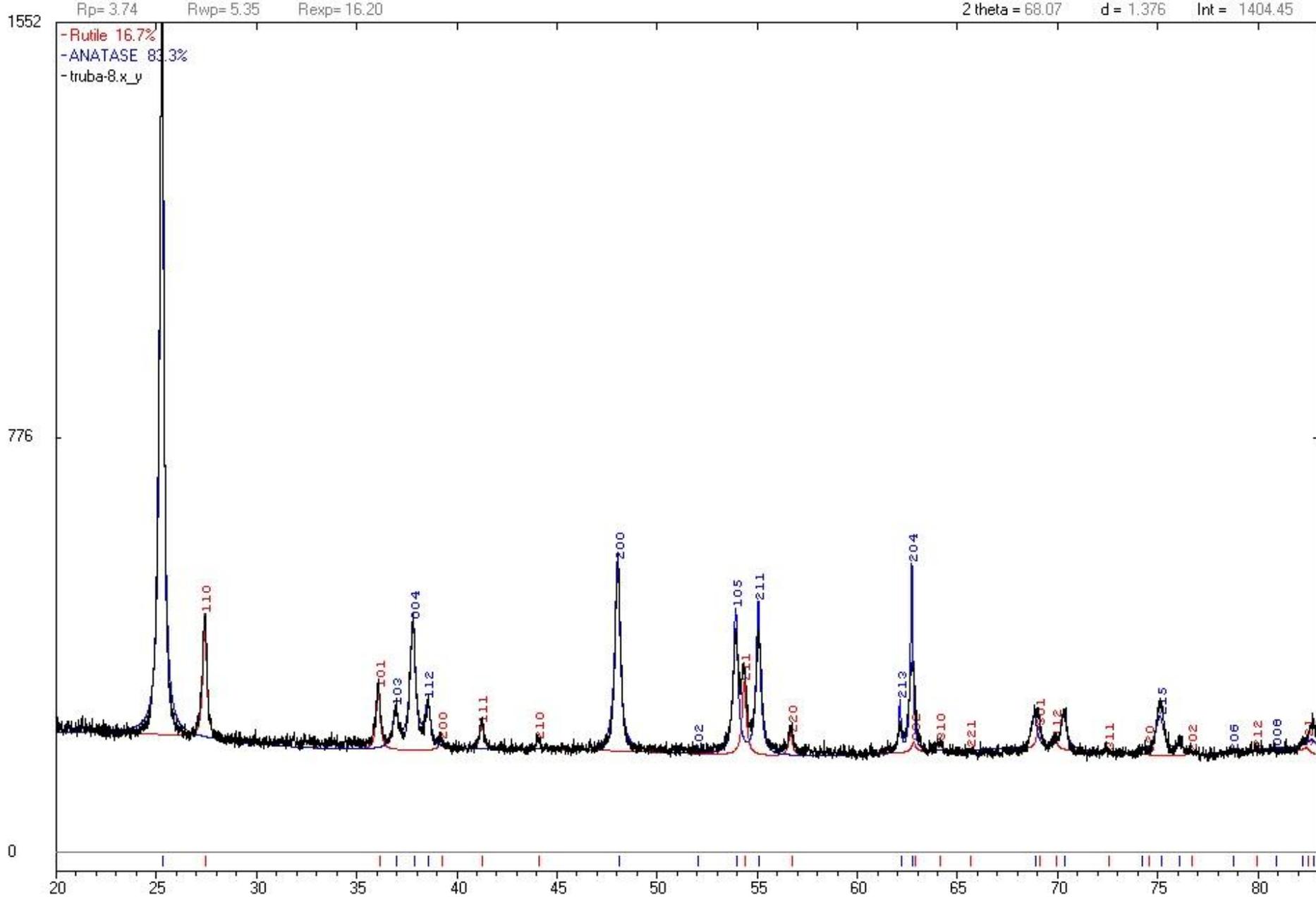


Рис.55. КФА по дифракционной картине нанопорошка TiO_2

МЕТОДЫ ПОЛУЧЕНИЯ ИНФОРМАЦИИ, В ОСНОВЕ КОТОРЫХ ЛЕЖИТ ЯВЛЕНИЕ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

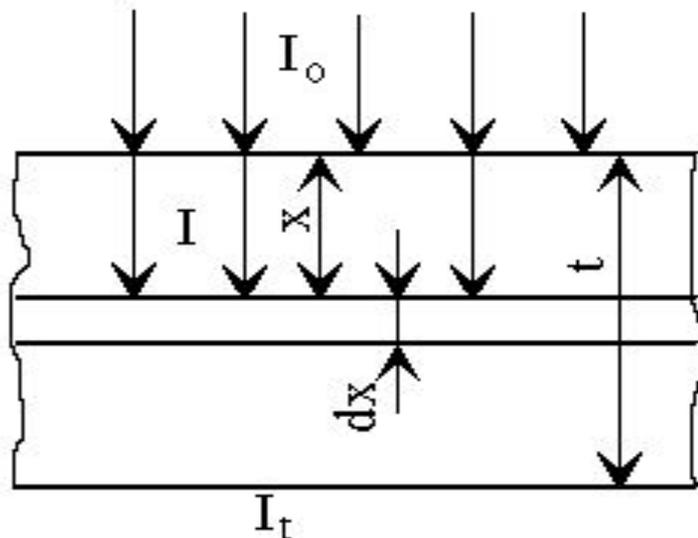


Рис. 1. К расчету
коэффициента ослабления

$I = I_0 \exp(-\mu_m \rho t)$ — закон ослабления рентгеновских лучей в веществе

μ_m — массовый коэффициент ослабления, равный сумме коэффициентов истинного поглощения (τ_m) и рассеяния (σ_m):

$$\mu_m = \tau_m + \sigma_m.$$

$\sigma_m \sim 0.2 \text{ см}^2/\text{г}$

ρ — плотность материала, t — толщина

$$\mu_m (\lambda, Z)$$

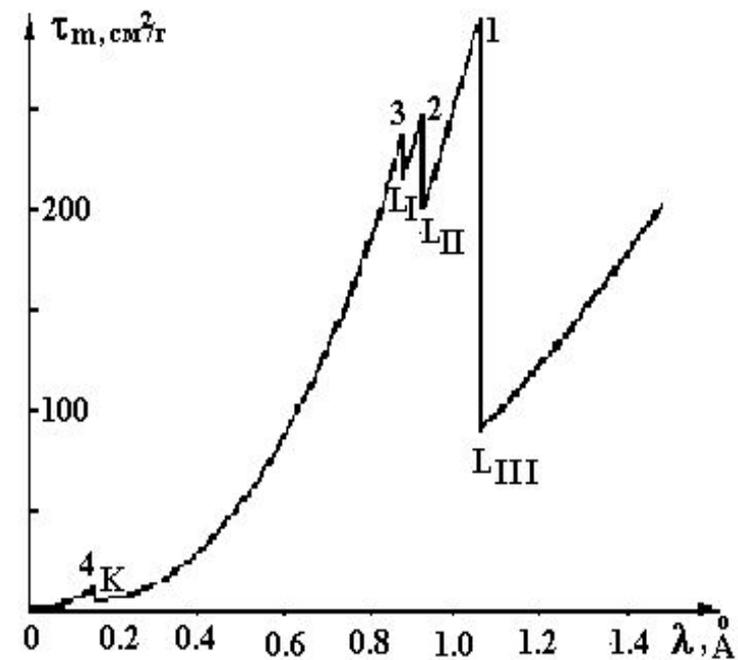


Рис.2. Зависимость коэффициента истинного поглощения платины (Pt) от длины волны падающего излучения

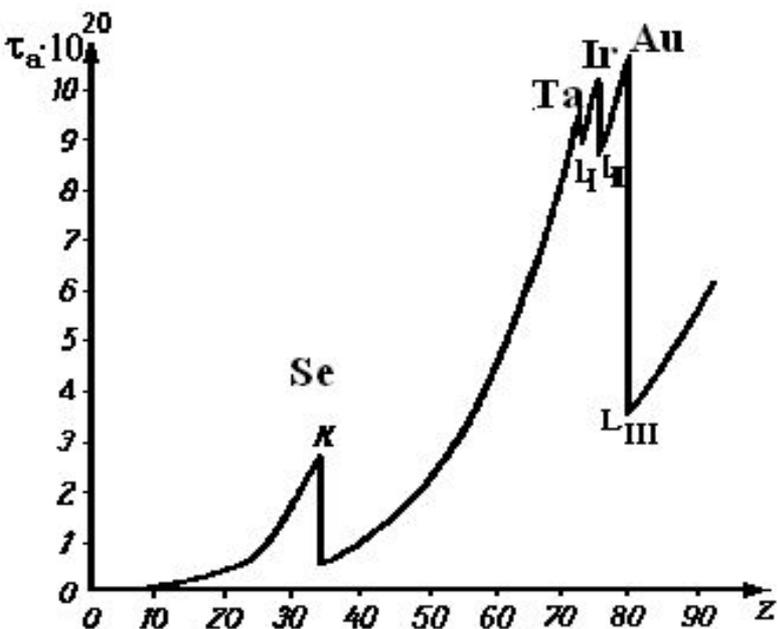


Рис. 3. Зависимость атомного коэффициента поглощения от атомного номера элемента Z для длины волны $\lambda = 1 \text{ \AA}$

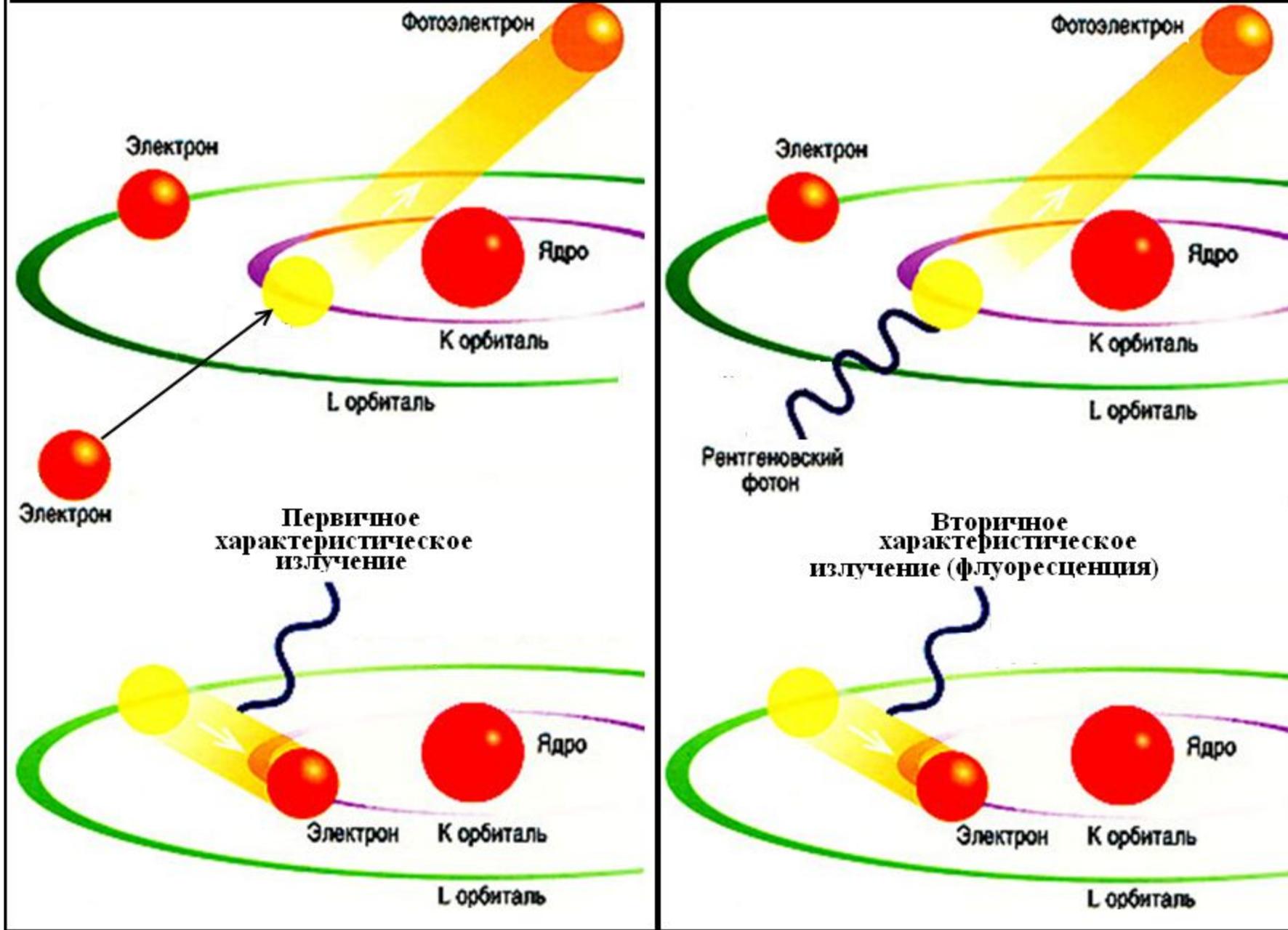
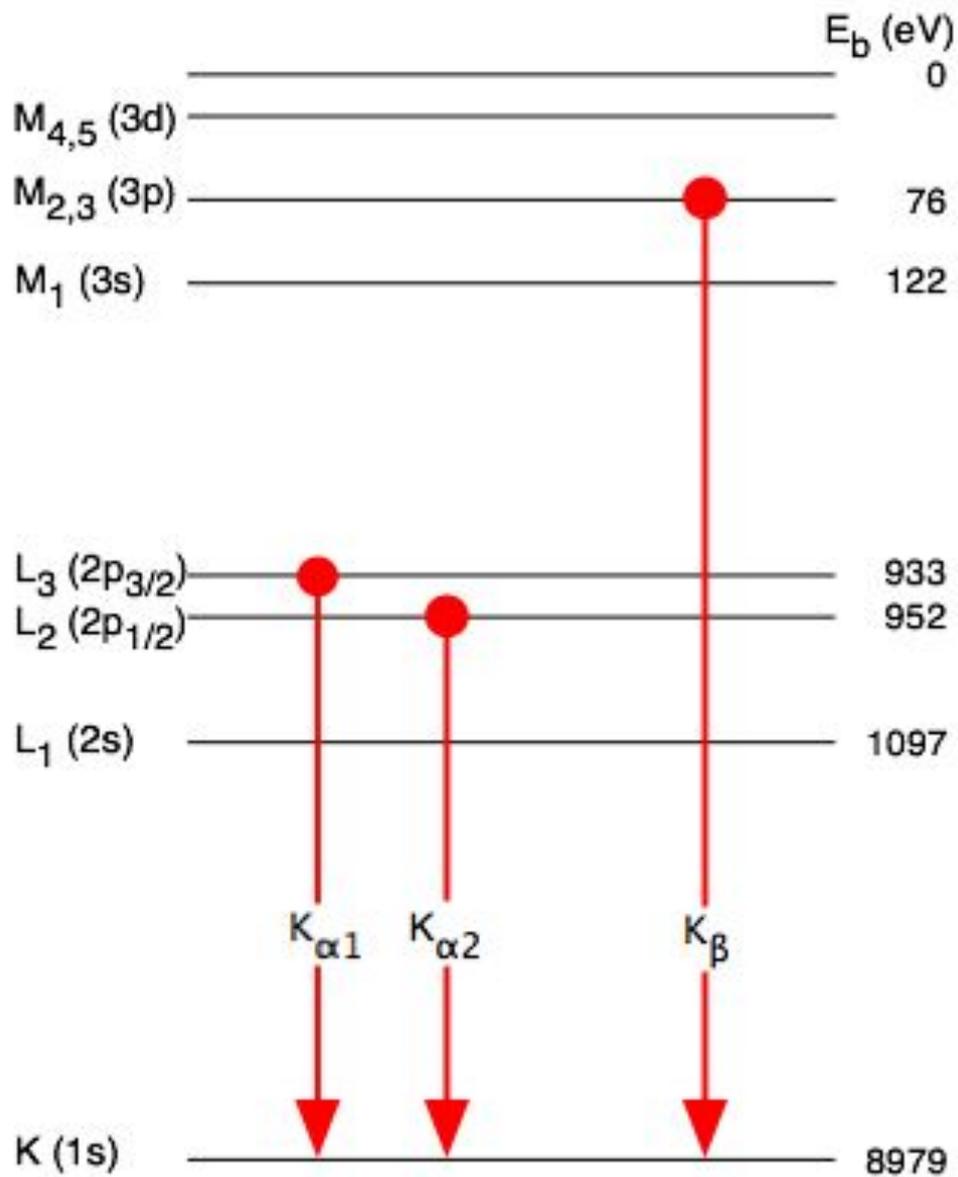


Рис. 4. Схема возникновения первичного и вторичного (флуоресцентного) рентгеновского характеристического излучения



**Рис.5 Энергетические уровни атома.
Разрешенные переходы электронов на К - уровень.**

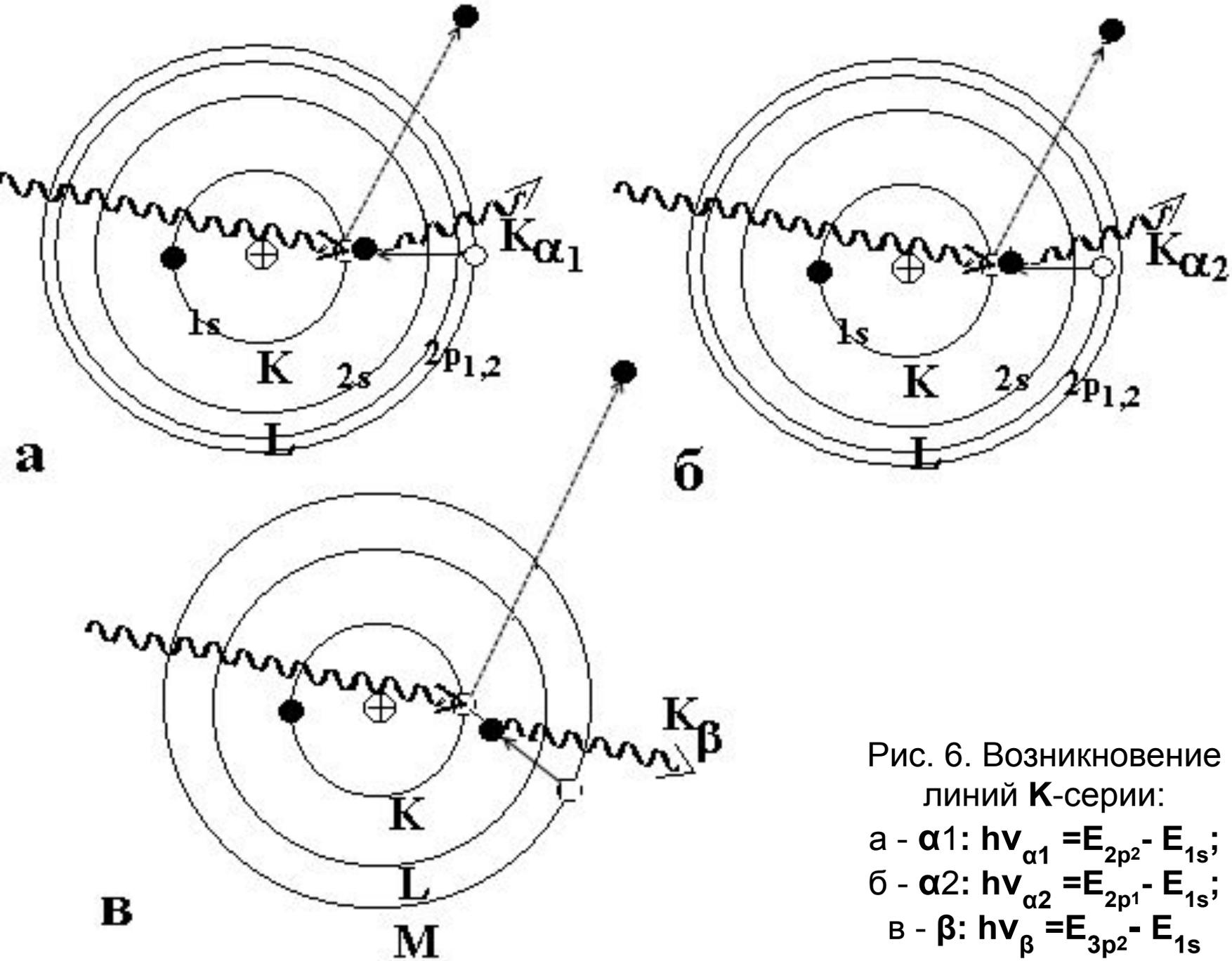


Рис. 6. Возникновение
линий К-серии:

а - α₁: $h\nu_{\alpha_1} = E_{2p^2} - E_{1s}$;

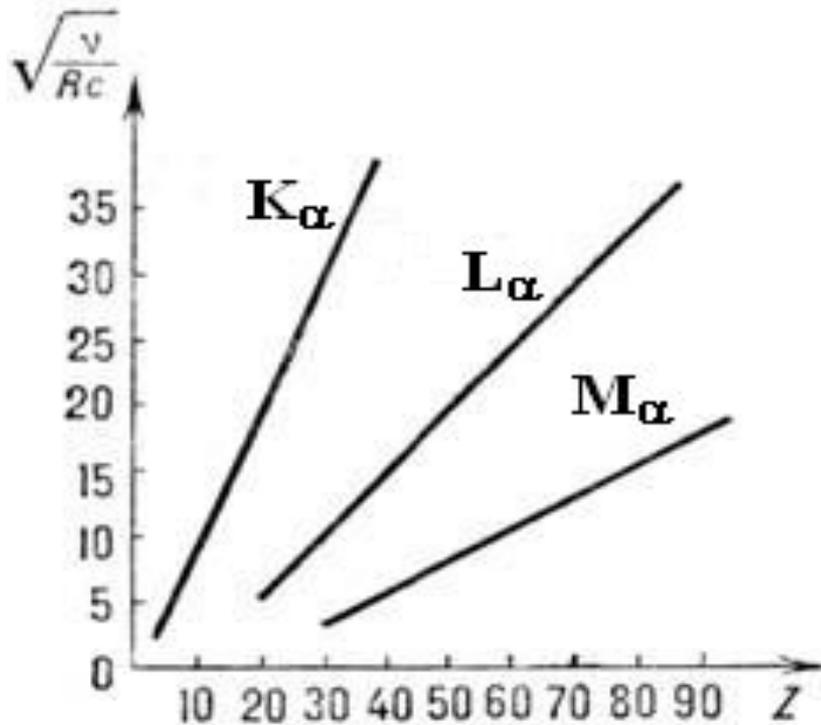
б - α₂: $h\nu_{\alpha_2} = E_{2p^1} - E_{1s}$;

в - β: $h\nu_{\beta} = E_{3p^2} - E_{1s}$

Закон Мозли 1913 г.

$$\sqrt{\frac{\nu}{R_c}} = (Z - \sigma_i) \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right)$$

$$; R_c = 3.29 \cdot 10^{-15} \text{ Гц}$$



Генри Гвин-Джеффрис Мозли (1887-1915), английский физик, Источник: © Calend.ru

<http://www.calend.ru/person/3467/>

Рис. 7. Зависимость корня из частоты вторичного излучения от атомного номера элемента

Определение коэффициента поглощения фона, создаваемого на рентгенограмме флуоресцентным излучением образца.

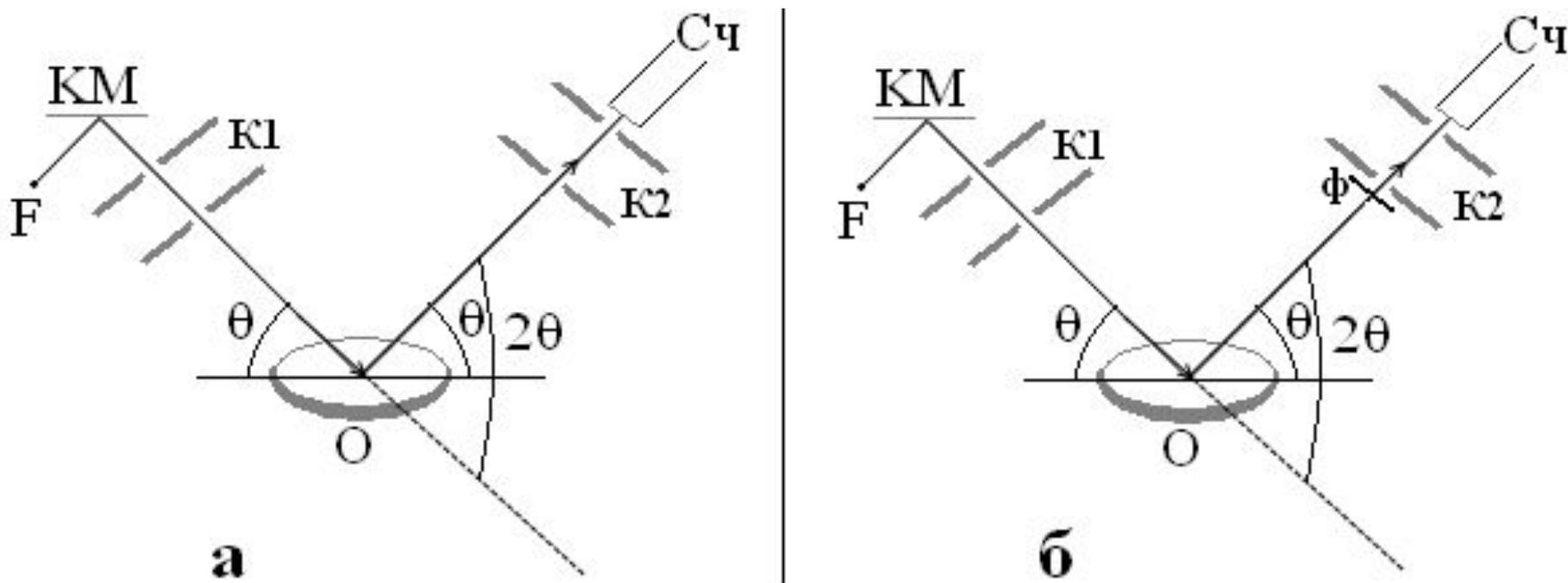


Рис. 8. Схема регистрации углового распределения интенсивности
а – без фильтра; б - с фильтром перед счетчиком

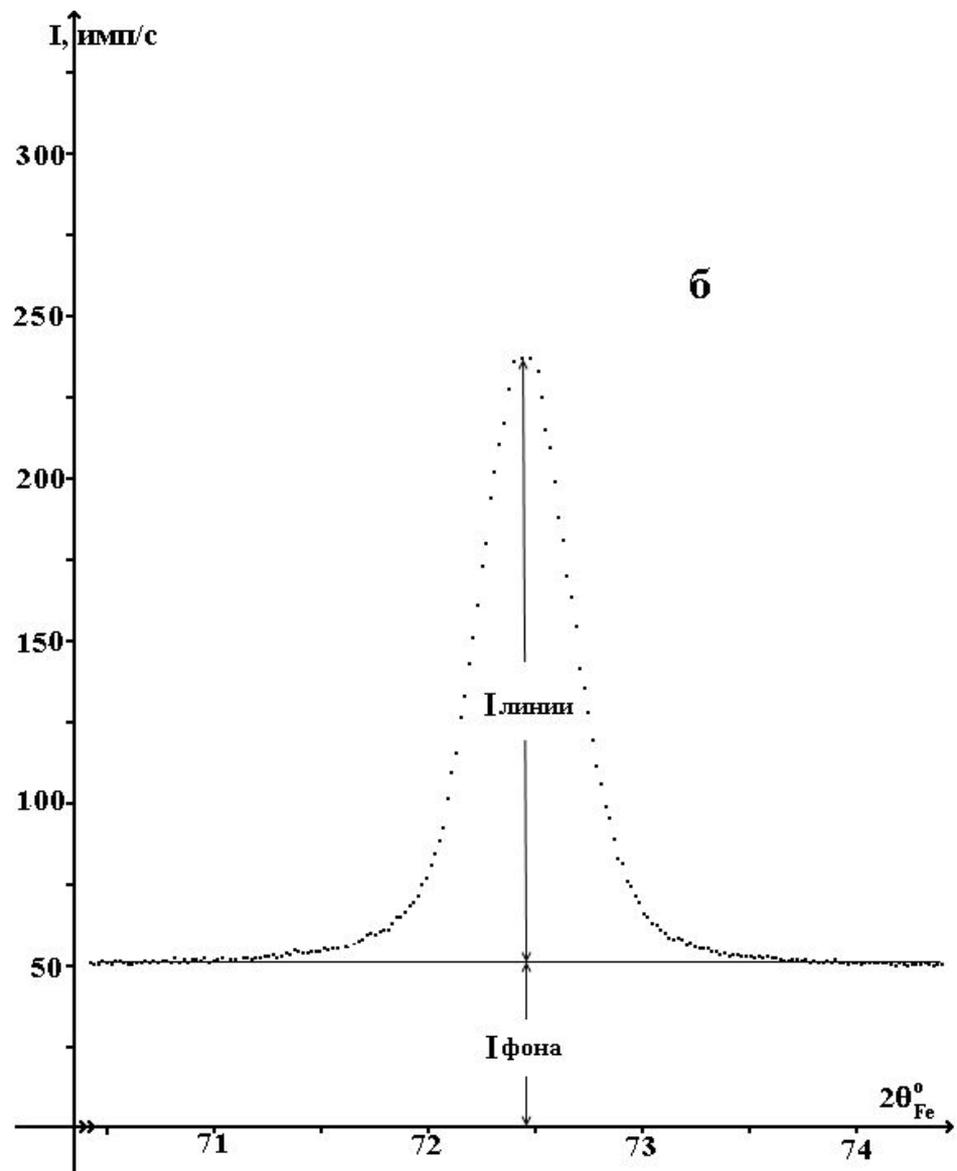
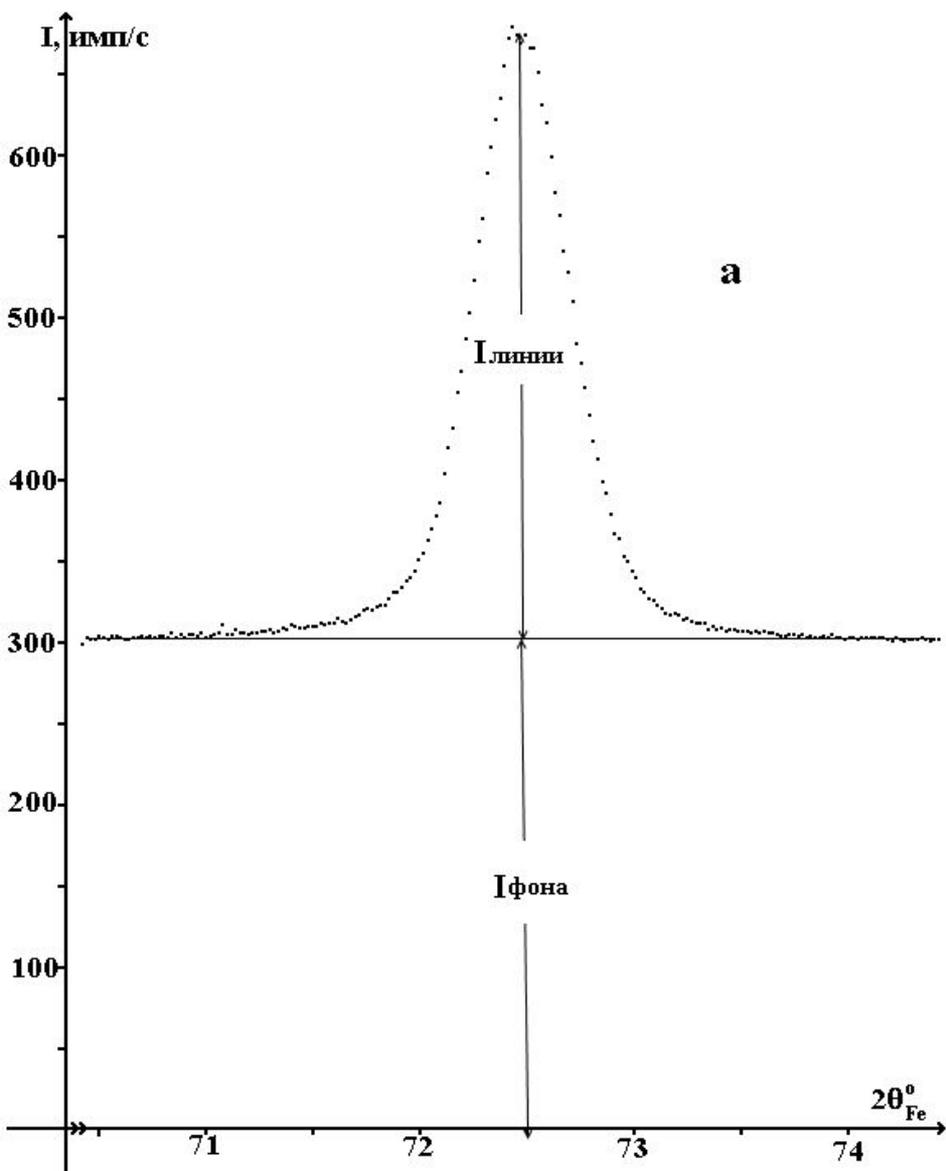


Рис. 9. Угловое распределение интенсивности а – без фильтра; б - с фильтром перед счетчиком

Контрастность рентгенограммы:

$$K = I_{\text{линии}} / I_{\text{фона}}$$

Закон ослабления для линии:

$$I_{\text{линия}}^{\text{фильтр}} = I_{\text{линия}} \exp(-\mu_m^{\text{линии}} \rho t)$$

$$\rho t = \frac{1}{\mu_m^{\text{линии}}} \ln \frac{I_{\text{линия}}}{I_{\text{линия}}^{\text{фильтр}}}$$

Закон ослабления для фона:

$$I_{\text{фон}}^{\text{фильтр}} = I_{\text{фон}} \exp(-\mu_m^{\text{фон}} \rho t)$$

$$\mu_m^{\text{фона}} = \frac{1}{\rho t} \ln \frac{I_{\text{фон}}}{I_{\text{фон}}^{\text{фильтр}}}$$

Методы рентгеновского анализа

- Рентгенфлуоресцентный анализ
 - Волнодисперсионный
 - Энергодисперсионный
 - Полного внешнего отражения
 - Со скользющим углом отбора
 - С поляризованным пучком
 - На сорбционных фидтрах
 - С различными видами возбуждения: синхротрон, частицы, радиоизотопы, трубки с капиллярной оптикой
- Рентгеновский эмиссионный анализ
- Рентгеновский микроанализ
- Рентгеновский абсорбционный анализ
 - Интегральный
 - Спектроскопия краев поглощения
- Рентгеновская дефектоскопия
- Фотоэлектронная спектроскопия
- Оже-электронная спектроскопия
- Рентгенолюминисцентный анализ
- Рентгенодифракционный анализ
- Рентгеновская рефлектометрия
- Рентгеновская рефрактометрия

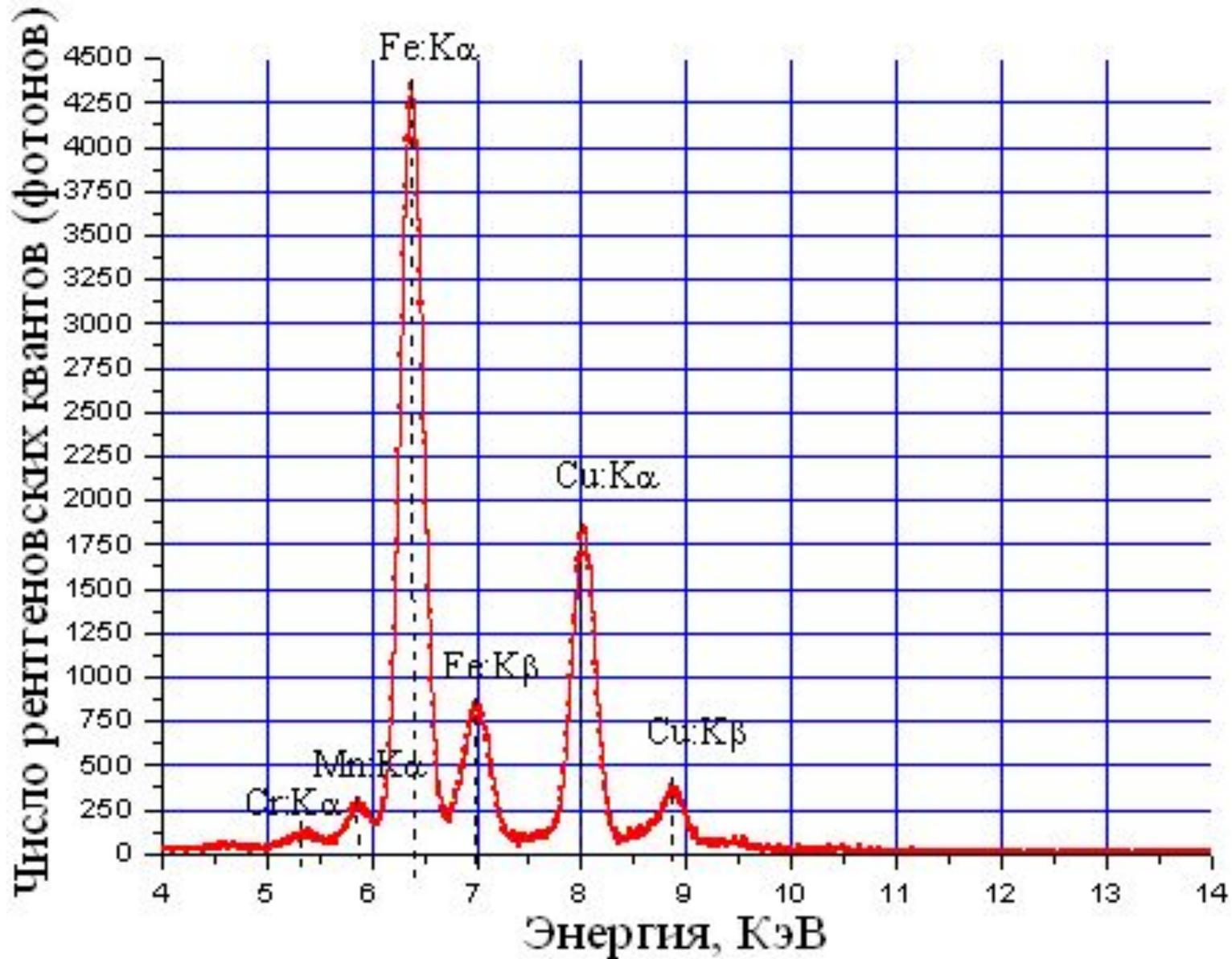


Рис.10. Результаты энергодисперсионного флуоресцентного анализа

EXAFS (ТСРП) – АНАЛИЗ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

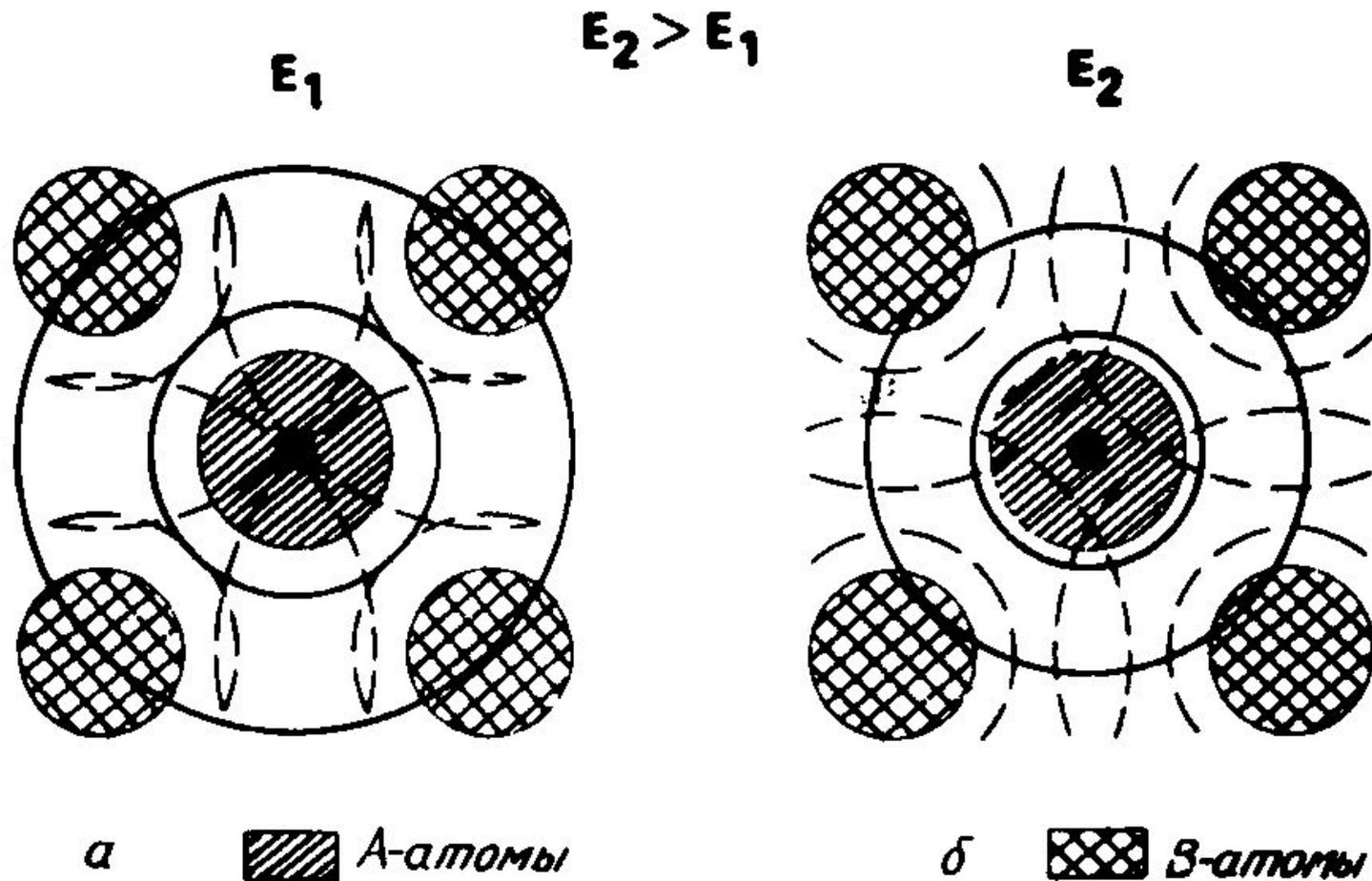
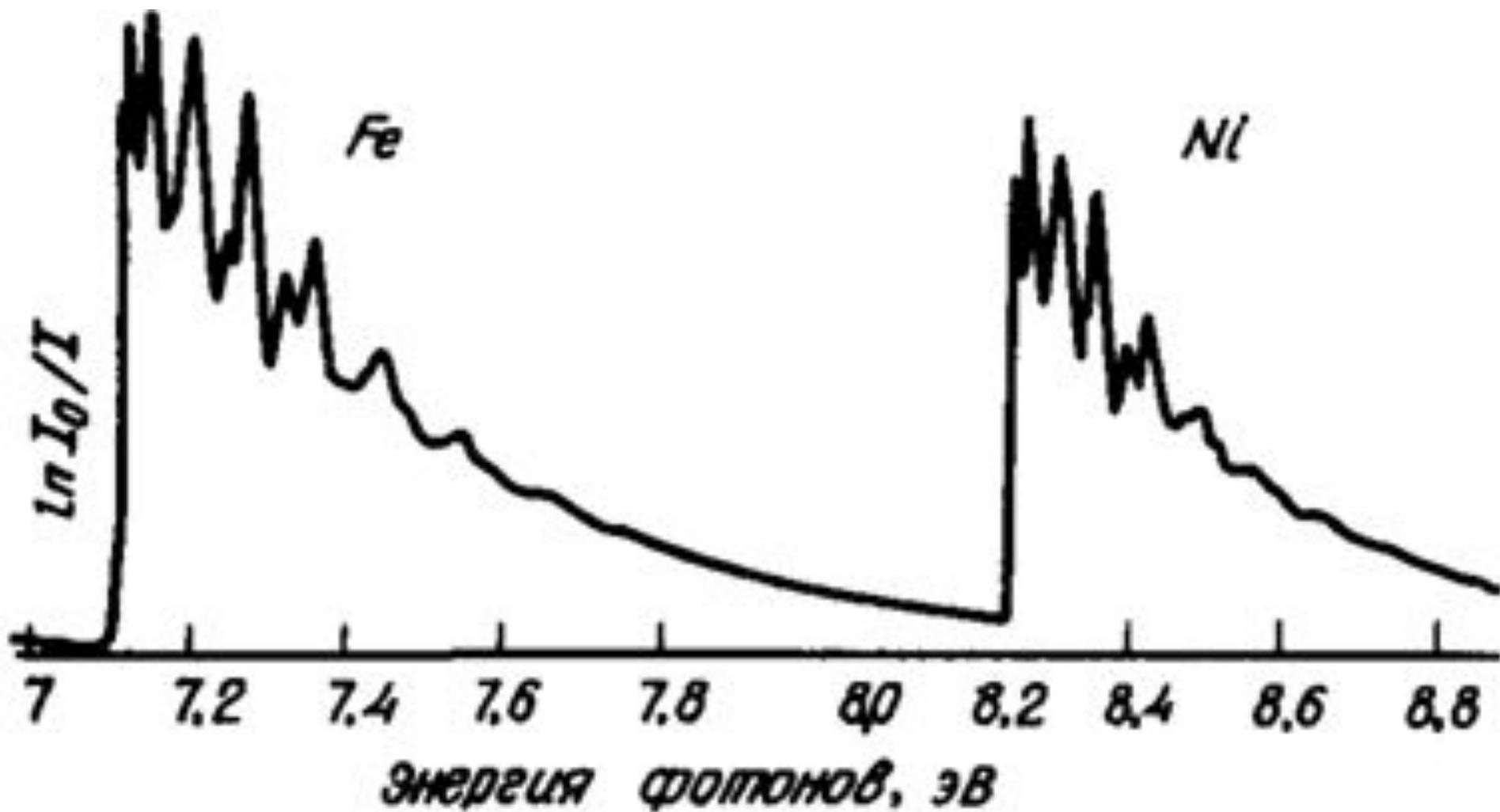


Рис. 11.Схематическое изображение появления спектра EXAFS

Рис. 12. Спектры EXAFS сплава железо-никель (Fe-Ni), имеющего ГЦК решетку и содержащего 45% никеля



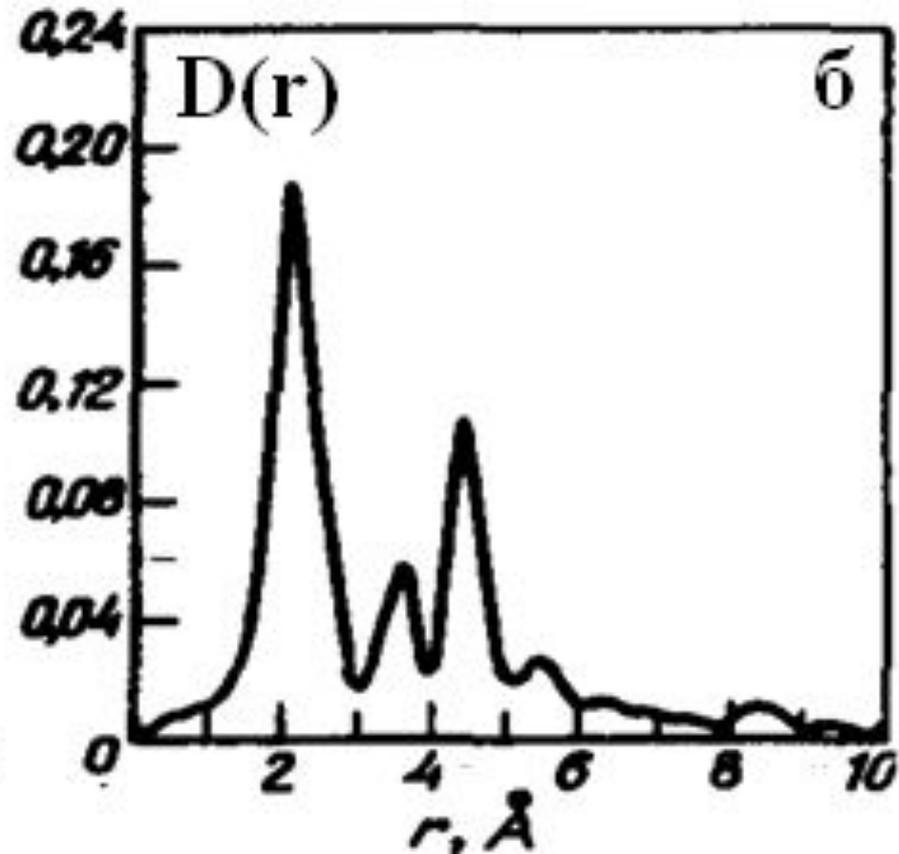
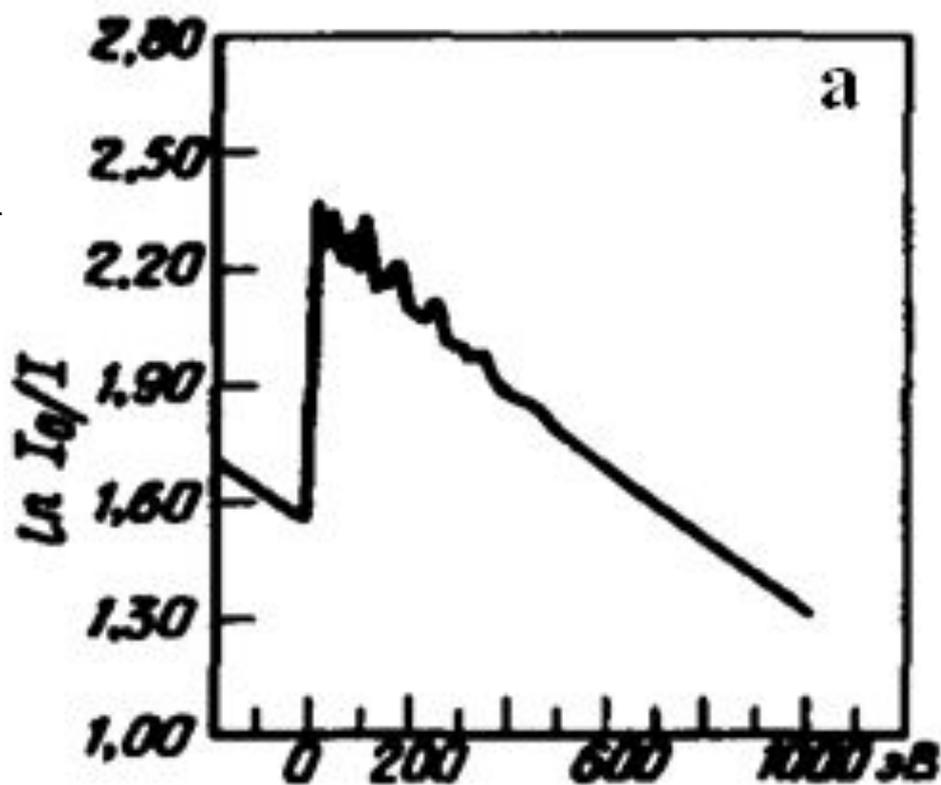


Рис. 13. а) Экспериментальный спектр EXAFS $\mu(E)$ вблизи К-края поглощения железа.

б) Распределение электронной плотности

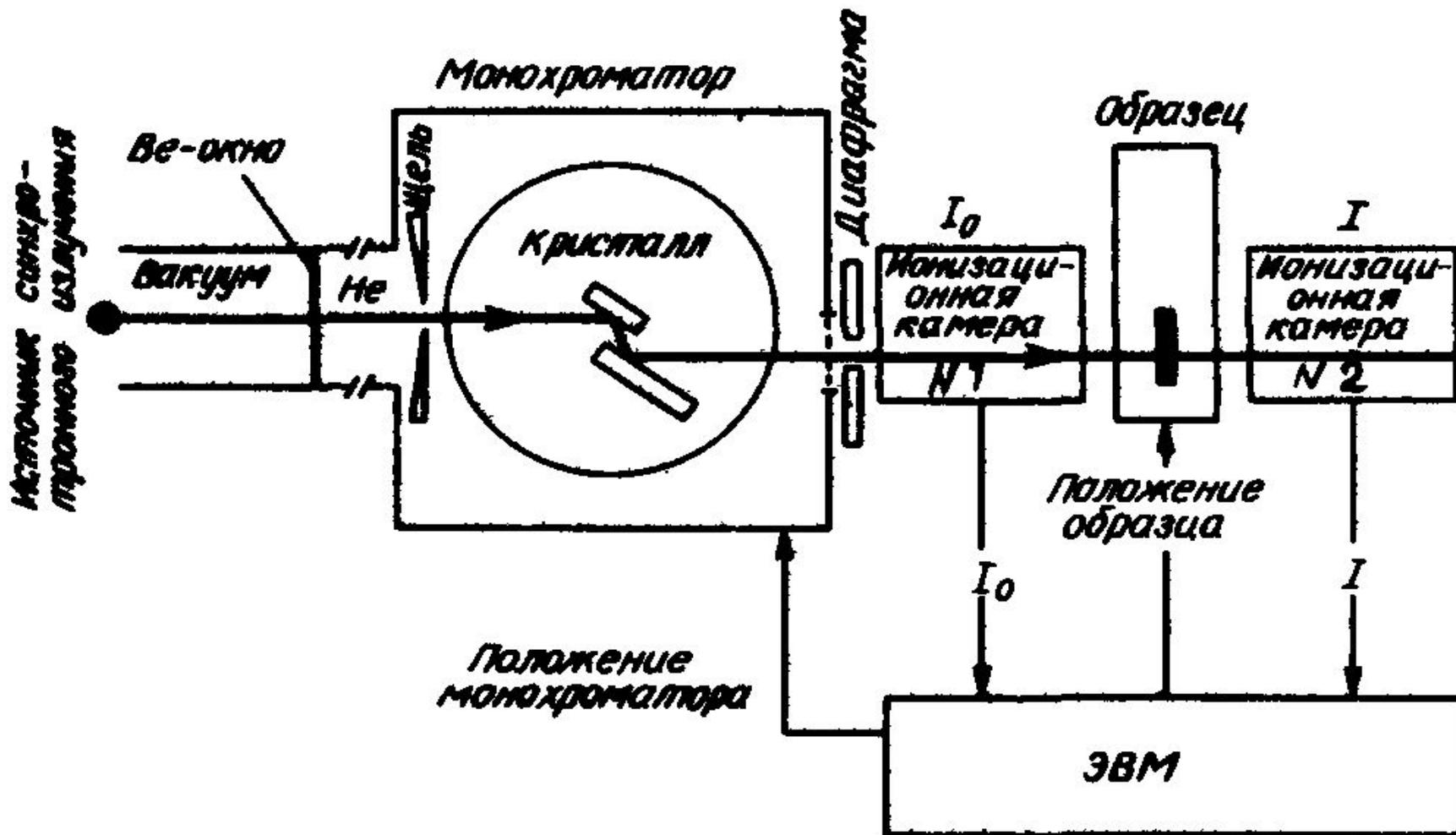


Рис. 14. Схема EXAFS-экспериментальной установки, используемой в Стэнфордской лаборатории синхротронного излучения

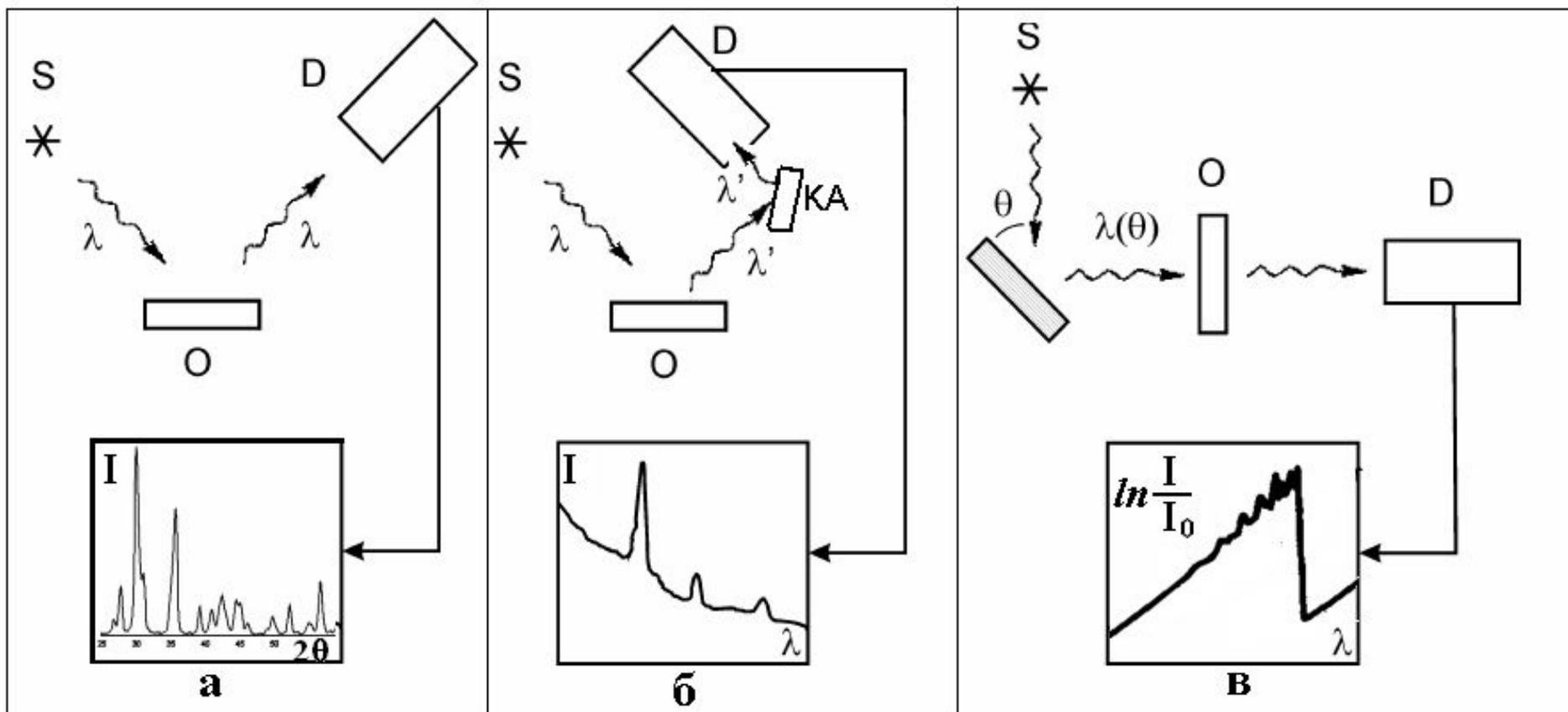


Рис. 15. Принципиальные блок-схемы

а) рентгеновской дифрактометрии;

б) рентгенофлуоресцентной спектрометрии;

в) рентгеновской спектрометрии поглощения (EXAFS, XANES)