

ОБУЧЕНИЕ СТУДЕНТОВ ИНЖЕНЕРНО-СТРОИТЕЛЬНЫХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ ОСНОВАМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ В КУРСЕ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

Н.П. Юркевич, Г.К. Савчук

Белорусский национальный технический университет, кафедра физики, г. Минск

Изложены основы метода порошковой дифрактометрии. Показано, что разнообразие физико-механических свойств песков обусловлено существующим многообразием типов кристаллических структур SiO_2 . Представлены основные элементы теоретического расчета рентгеновских дифракционных картин для различных модификаций песка.

В настоящее время одним из наиболее часто используемых методов для изучения кристаллического строения веществ, в том числе и песка SiO_2 , является метод порошковой рентгеновской дифрактометрии. Благодаря прогрессу в компьютерной технике и в области программирования открываются возможности для эффективного обучения студентов основам рентгеновской дифрактометрии путем использования компьютерной структурной кристаллографии.

Целью данной работы является разработка комплексного методического обеспечения учебного процесса по изучению кристаллической структуры песка методом рентгеновской дифрактометрии в курсе общей физики.

При выполнении лабораторной работы студенты должны решить следующие задачи:

- изучить основные закономерности дифракции рентгеновских лучей в кристаллах;
- изучить особенности кристаллического строения твердых тел;
- ознакомиться с основами метода порошковой рентгенографии;
- приобрести навыки работы с профессиональной программой по структурной кристаллографии;
- при помощи компьютерной программы произвести расчет рентгеновских дифракционных картин для различных типов кристаллических структур песка SiO_2 ;
- нарисовать элементарную кристаллическую ячейку с расположенными в ней атомами для различных структурных модификаций песка;
- на основе проведенного исследования сделать выводы об особенностях кристаллического строения песка различных модификаций.

В данной работе студентам предлагается изучить порошкообразные монокристаллические пески SiO_2 , имеющие решетки, относящиеся к тетрагональной (стишовит) и кубической (β -кristобалит) сингонии, для которой характерны примитивная, объемноцентрированная и гранецентрированная элементарные ячейки.

Теоретический расчет интенсивностей дифракционных пиков и межплоскостных расстояний, построение штрих-диаграмм и элементарных ячеек производится с помощью компьютерной программы Cell.exe.

Задание 1. Для SiO_2 (β -квистобалит) кубической сингонии по заданным параметрам примитивной кристаллической ячейки $a = 13,402 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ вычислите межплоскостные расстояния и относительные интенсивности дифракционных пиков. По полученным данным постройте штрих-диаграмму и нарисуйте элементарную ячейку с расположенными в ней атомами. Штрих-диаграмму и рисунок элементарной ячейки представьте в отчете.

В таблице 1 приведены данные, которые необходимы для расчета интенсивностей дифракционных пиков и изображения элементарной кристаллической ячейки β -квистобалита.

Таблица 1 – Характеристики примитивной элементарной кристаллической ячейки β -квистобалита

N п/п	Атом N	Валентность A	Заселенность m	Тепловой фактор B_i	Координаты		
					x	y	z
1	Si	0	1	0	0	0	
2	O	0	1	0	0	0,5	

Задание 2. Вычислите межплоскостные расстояния и относительные интенсивности дифракционных пиков для модификации SiO_2 стишовит с примитивной кристаллической ячейкой тетрагональной сингонии. Параметры решетки и углы между ребрами элементарной ячейки равны: $a = b = 4,1772 \text{ \AA}$, $c = 2,6651 \text{ \AA}$ и $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. По полученным данным постройте штрих-диаграмму и нарисуйте элементарную ячейку с расположенными в ней атомами. Рисунки штрих-диаграммы и элементарной ячейки представьте в отчете.

В таблице 2 приведены данные, которые необходимы для расчета интенсивностей дифракционных пиков и изображения элементарной кристаллической ячейки стишовита.

Таблица 2 – Характеристики примитивной элементарной кристаллической ячейки стишовита

N п/п	Атом N	Валентность A	Заселенность m	Тепловой фактор B_i	Координаты		
					x	y	z
1	Si	0	1	0	0	0	
2	O	0	1	0	0,3062	0,3062	0

Задание 3. Проведите сравнительный анализ штрих-диаграмм для кубической и тетрагональной кристаллических структур песка SiO_2 и сделайте выводы.