

Демо-вариант контрольной работы №1

1. Монокристалл MgO ($Fm-3m$, $a = 4.2112 \text{ \AA}$) вырезан вдоль плоскости (100). Вы поместили этот монокристалл на держатель порошкового дифрактометра ($\text{Cu } K\alpha_1$, $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$) и регистрируете дифрактограмму в диапазоне углов $2\theta = 10 - 140^\circ$, геометрия «на отражение», плоскость монокристалла параллельна плоскости держателя. Какие рефлексы Вы увидите? На каких углах? Как зарегистрировать рефлекс (111) этого монокристалла? Для ответа на последний вопрос изобразите схему эксперимента, вычислите, если получится, необходимые углы?
2. Вам предложили заказать фольгу для изготовления β -фильтров. У Вашего дифрактометра трубка с кобальтовым анодом, поэтому Вы решили взять железную фольгу. Ваш руководитель настаивает, что рефлексы от $\text{Co } K\beta$ по интенсивности не должны превышать 0.5% от интенсивности рефлексов $\text{Co } K\alpha_{1+2}$. Массовые коэффициенты поглощения Fe для $\text{Co } K\beta$ равны $339.1 \text{ см}^2/\text{г}$, для $\text{Co } K\alpha_{1+2}$ - $56.3 \text{ см}^2/\text{г}$ (для $\text{Co } K\alpha_1$ и $\text{Co } K\alpha_2$ коэффициенты можно считать одинаковыми), плотность железа равна 7.9 г/см^3 . Какой толщины фольга Вам необходима? Во сколько раз ослабнут рефлексы от $\text{Co } K\alpha_{1+2}$ при применении такого фильтра?
3. Рассчитайте интенсивности рефлексов (111) и (300) на дифрактограмме поликристаллического образца Cu ($a = 3.615 \text{ \AA}$, S.G. $Fm-3m$, единственный симметрически неэквивалентный атом меди имеет координаты (0,0,0), тепловыми колебаниями пренебрегайте, заселенность позиции единичная). Для упрощения расчетов считайте, что рассеивающий фактор железа $F_{\text{Cu}} = Z_{\text{Cu}} e^{\frac{\sin \theta}{\lambda}}$, показатель экспоненты в $\text{\AA}^{-1}$, аномальным рассеянием можно пренебречь. Съемка проводится на излучении $\text{Cu } K\alpha_1$, $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$, 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.
4. При каком x интенсивность рефлекса (100) в твердом растворе $\text{Cs}_{1-x}\text{Na}_x\text{Br}$ (структурный тип CsCl , $Pm-3m$, координаты независимых атомов – 0,0,0 для катиона и 0.5,0.5,0.5 для аниона) минимальна? Тепловыми колебаниями пренебрегайте, атомные факторы рассеяния считайте равными $F = Ze^{\frac{\sin \theta}{\lambda}}$ для всех атомов.
5. Вы получили одномерный монокристалл – соединение, по одной оси у которого есть строгая периодичность, а по остальным никакой периодичности нет (или период уж слишком велик – например, заряженные нанотрубки или поликатион регулярного полимера). Как будет выглядеть дифракционная картинка от такого объекта на фотопластинке, если ось периодичности совпадает по направлению с первичным пучком? Перпендикулярна ему?