

УДК 548+535
ББК 22.37+24.5+22.346
К 92

**Куприянов М. Ф., Рудская А. Г., Кофанова Н. Б., Каби-
ров Ю. В., Разумная А. Г.**

К 92

Современные методы структурного анализа веществ: учеб-
ник / М. Ф. Куприянов, А. Г. Рудская, Н. Б. Кофанова, Ю. В. Ка-
биров, А. Г. Разумная. – Ростов н/Д: Изд-во ЮФУ, 2009. – 288 с.

ISBN 978-5-9275-0653-8

В учебнике подробно рассмотрены основы структурной кристал-
лографии и кристаллохимии, физика дифракции рентгеновских лу-
чей, нейтронов и электронов, анализа атомного строения веществ. Осо-
бое внимание уделено достоверности и точности результатов структур-
ного анализа.

Учебник может быть использован при подготовке студентов и аспи-
рантов физических, химических, геологических, биологических и ма-
териаловедческих специальностей, а также инженерами и научными
работниками, занимающимися разработкой новых материалов различ-
ного применения.

ISBN 978-5-9275-0653-8

**УДК 548+535
ББК 22.37+24.5+22.346**

© Куприянов М. Ф., 2009
© Рудская А. Г., 2009
© Кофанова Н. Б., 2009
© Кабиров Ю. В., 2009
© Разумная А. Г., 2009
© Оформление. Макет. Издательство
Южного федерального университета, 2009

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
----------------	---

ГЛАВА I

ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

И КРИСТАЛЛОХИМИИ	9
------------------------	---

1.1. Основы структурной кристаллографии	13
---	----

1.2. Основы кристаллохимии	27
----------------------------------	----

ГЛАВА II

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ	44
-------------------------------------	----

2.1. Основы физики рентгеновских лучей	44
--	----

2.1.1. Интенсивности рентгеновских спектров	44
---	----

2.1.2. Форма и ширина линий рентгеновского спектра	50
--	----

2.1.3. Истинное поглощение рентгеновских лучей	54
--	----

2.2. Дифракция рентгеновских лучей и определение структур веществ	57
--	----

2.2.1. Рассеяние рентгеновских лучей электронами, атомами, газами и жидкостями	59
---	----

2.2.2. Рассеяние рентгеновских лучей кристаллами	77
--	----

2.2.3. Распределение электронной плотности в ячейке	89
---	----

2.2.4. Метод межатомной функции	98
---------------------------------------	----

2.2.5. Метод минимизации структурного функционала	104
---	-----

ГЛАВА III

ТЕПЛОВЫЕ КОЛЕБАНИЯ АТОМОВ.

ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ	108
---	-----

3.1. Основы динамики решетки	108
------------------------------------	-----

3.2. Фактор Дебая-Валлера	118
---------------------------------	-----

3.3. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей	120
--	-----

ГЛАВА IV	
МЕТОД ПОРОШКА В РЕНТГЕНОГРАФИИ	149
ГЛАВА V	
ДИФРАКЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ И НЕЙТРОНОВ	168
5.1. Дифракция электронов	168
5.2. Дифракция нейтронов	185
5.3. Динамика решетки и рассеяние нейтронов	201
ГЛАВА VI	
НОВЫЕ МЕТОДЫ СТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА	231
6.1. Общие проблемы традиционных методов рентгеноструктурного анализа	231
6.2. Примеры применения рентгендифракционных методов	249
6.3. Структурный анализ сегнетоэлектриков	261
6.4. Ограничения методов рентгеноструктурного анализа	284
ЛИТЕРАТУРА	287