

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 структу-  
рного 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

<b>ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ И КРИСТАЛЛОХИМИИ .....</b>	<b>9</b>
1.1. Основы структурной кристаллографии .....	13
1.2. Основы кристаллохимии .....	27

### ГЛАВА II

<b>ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ .....</b>	<b>44</b>
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

<b>ТЕПЛОВЫЕ КОЛЕБАНИЯ АТОМОВ. ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ .....</b>	<b>108</b>
3.1. Основы динамики решетки .....	108
3.2. Фактор Дебая-Валлера .....	118
3.3. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей .....	120

<b>ГЛАВА IV</b>	
<b>МЕТОД ПОРОШКА В РЕНТГЕНОГРАФИИ .....</b>	<b>149</b>
<b>ГЛАВА V</b>	
<b>ДИФРАКЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ И НЕЙТРОНОВ .....</b>	<b>168</b>
5.1. Дифракция электронов .....	168
5.2. Дифракция нейтронов .....	185
5.3. Динамика решетки и рассеяние нейтронов .....	201
<b>ГЛАВА VI</b>	
<b>НОВЫЕ МЕТОДЫ СТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА .....</b>	<b>231</b>
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
<b>ЛИТЕРАТУРА .....</b>	<b>287</b>