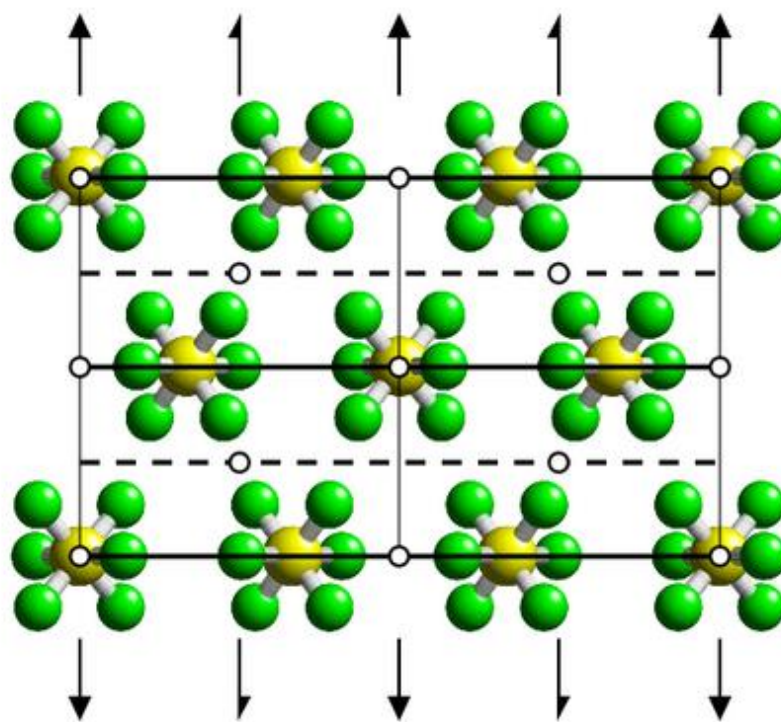


- В чем разница между когерентным и некогерентным рассеянием электромагнитной волны?
- Какие величины определяют интенсивность рассеянной электроном поляризованной рентгеновской волны?
- Почему важно понять от каких величин зависит интенсивность рассеянной электроном рентгеновской волны?
- Что определяет рассеивающую способность атома? Чему она равна при $\sin\theta/\lambda = 0$?
- Чему равен квадрат комплексного числа?
- Что такое «структурная амплитуда»? Почему ее математическое выражение передается комплексным числом?
- От каких величин зависит фаза волны, рассеянной элементарной ячейкой?
- Какая существует связь между индексами плоскостей и дифракции?
- Дифракционная картина кристалла не содержит отражения $h0l$ с индексами $h = 2n+1$ и $0kl$ с $l = 2n+1$. Какие в этом случае возможны пр. гр.?



Определите пространственную группу этого моноклинного кристалла (ось c – перпендикулярна плоскости рисунка) и укажите, какие рефлексы на его дифракционной картине будут отсутствовать.

- Как строится обратная решетка?
- Для каких целей она служит?

Напишите квадратичную формулу для гексагональной сингонии. На каком угле θ при съемке гексагонального кристалла ($a = 9.40$, $c = 6.88 \text{ \AA}$) на Cu -излучении ($\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$) проявится рефлекс 213?

Решение: $1/d^2 = 0.075 + 0.19 + 0.031 = 0.296$; $d = 1.838$; $\sin \theta = 0.419$; $\theta = 24.80^\circ$

Какие рефлексы будут отсутствовать у кристалла с пр. гр. $Pnam$?

- Какой физический смысл у фактора Лоренца?

Какой знак следует поставить при сравнении величин F_v и F_Σ (между ними)? Что делают, чтобы их приблизить?

От каких величин зависит структурная амплитуда?

Каким параметром определяется корректность модели, используемой при расчете теоретической рентгенограммы?

На какие виды структурной разупорядоченности указывают диффузные области с большей интенсивностью между Брэгговскими отражениями: а) при увеличении интенсивности диффузного рассеяния и росте индексов отражений; б) с большей интенсивностью вблизи начала координат обратной решетки.

С какими процессами связано неупругое рассеяние рентгеновской волны и соответственно изменение ее длины? Как она меняется и от чего зависит это изменение?

От каких величин зависит ширина дифракционных отражений? Какая величина используется для ее оценки? Что понимается под физическими и инструментальными причинами расширения рефлексов?

На чем основан и для каких целей служит метод Ритвельда? Что он предполагает на самом первом этапе? В каком случае можно сократить время съемки образца? Какие условия нужно соблюдать при съемке? Каким образом достигается лучшее соответствие между теоретической (расчетной) и экспериментальной дифракционными картинами?

Что минимизируется в процессе уточнения по методу наименьших квадратов? За счет коррекции каких величин?

Ключевой этап уточнения по методу Ритвельда связан с включением в расчет функции формы пика. Какая величина используется во всех ее выражениях? С чем связано введение в расчет коэффициента приведения и определение 0 счетчика? Как учитывается уменьшение фона при увеличении угла 2θ ? Критерии качества проведенного расчета.