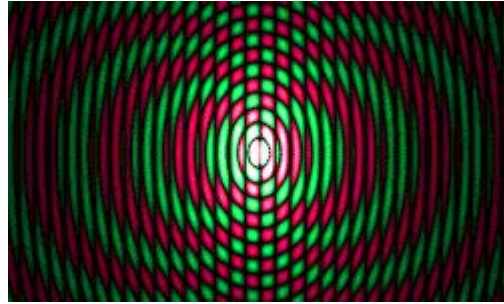


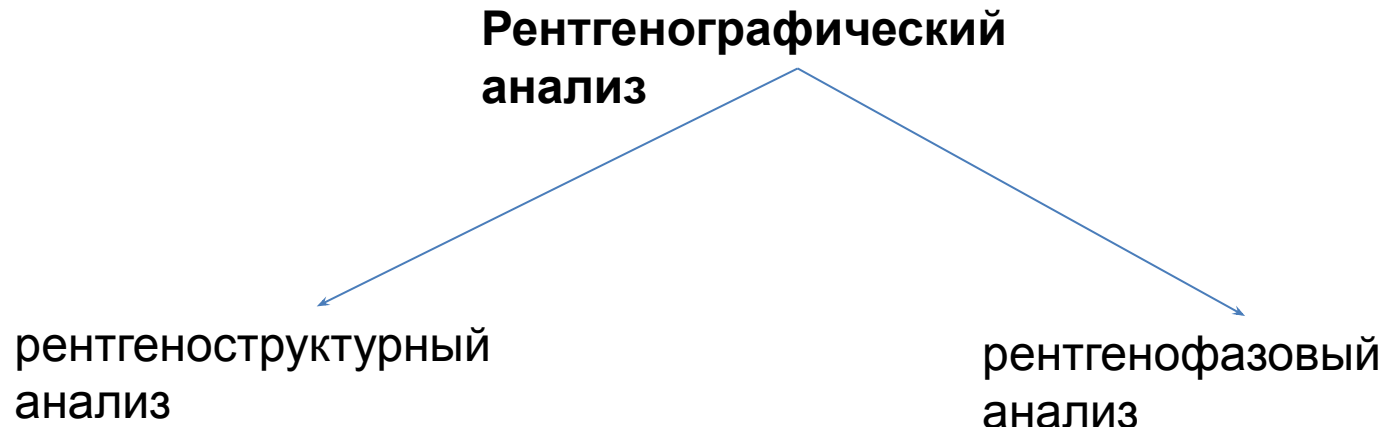
Основные понятия

Интерференция волн — взаимное усиление или ослабление амплитуды двух или нескольких когерентных волн, одновременно распространяющихся в пространстве. Сопровождается чередованием максимумов и минимумов интенсивности в пространстве. Результат интерференции (интерференционная картина) зависит от разности фаз накладывающихся волн.

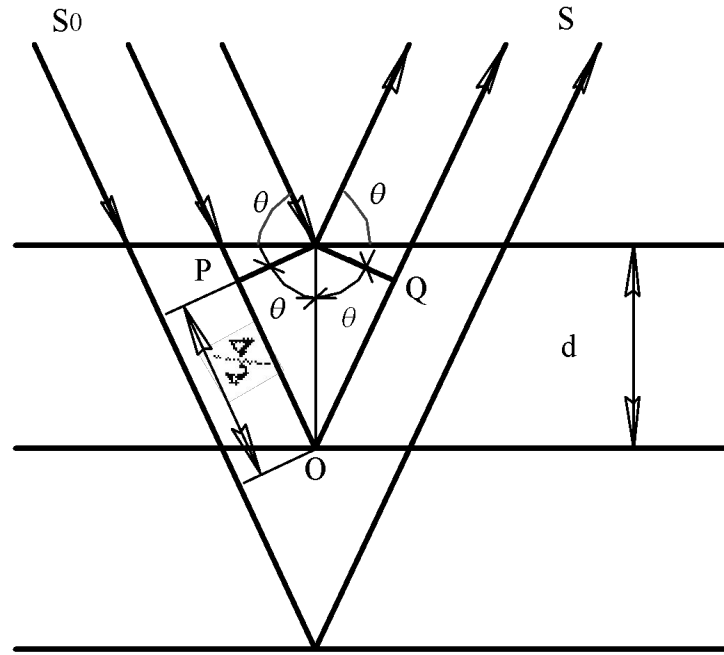


Дифракция волн — явление, которое можно рассматривать как отклонение от законов геометрической оптики при распространении волн. Первоначально понятие дифракции относилось только к огибанию волнами препятствий, но в современном, более широком толковании, с дифракцией связывают весьма широкий круг явлений, возникающих при распространении волн в неоднородных средах, а также при распространении ограниченных в пространстве волн. Явление дифракции зачастую трактуют как частный случай интерференции (интерференция вторичных волн)

Рентгенографический анализ – это совокупность методов исследования кристаллических веществ, основанных на отражении ими рентгеновских лучей.



Уравнение Брэгга



S_0 – пучок монохроматических рентгеновских лучей, падающих под углом θ на семейство параллельных атомных плоскостей, S – пучок дифрагированных лучей.

$$\Delta = n\lambda \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

$$\Delta = PO + OQ = 2PO = 2d\sin\theta$$

$$2d\sin\theta = n\lambda$$

Аппаратное оформление

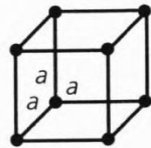


Кристаллическое строение

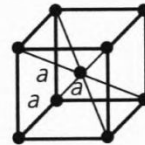
Решетка	углы	Повторяющиеся размеры по осям
Кубическая	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b = c$
Орторомбическая	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$
Моноклинная	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$	$a \neq b \neq c$
Триклинная	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	$a \neq b \neq c$
Тетрагональная	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a = b \neq c$
Ромбоэдрическая (тригональная)	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$a = b = c$
Гексагональная	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$a = b \neq c$

Кристаллические решетки Бравэ

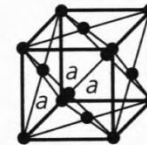
Простая кубическая



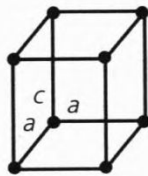
Объемно-центрированная кубическая



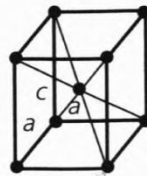
Гранецентрированная кубическая



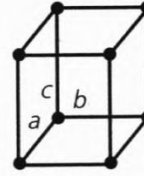
Простая тетрагональная



Объемно-центрированная кубическая¹



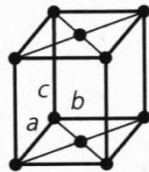
Простая орторомбическая



Объемно-центрированная орторомбическая



Базоцентрированная орторомбическая



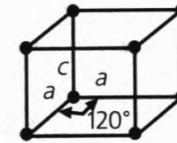
Гранецентрированная орторомбическая



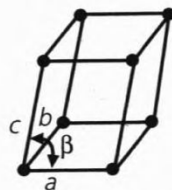
Ромбоэдрическая (тригональная)



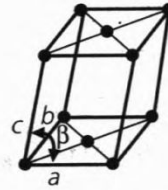
Гексагональная



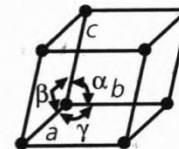
Простая моноклинная



Базоцентрированная моноклинная



Триклинная



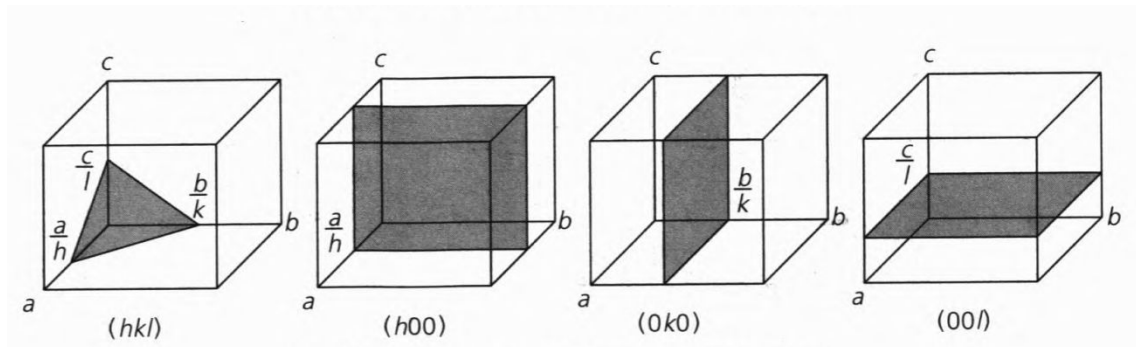
Кристаллографические плоскости

Плоскость может быть представлена в виде уравнения

$$x_3 = c_1 x_1 + c_2 x_2 + c_3$$

$$\left(\frac{h}{a}\right)x_1 + \left(\frac{k}{b}\right)x_2 + \left(\frac{l}{c}\right)x_3 = 1$$

Кристаллографические плоскости обычно обозначают, используя коэффициенты h , k , и l . Сочетание $(h\ k\ l)$ называется индексом Миллера плоскости



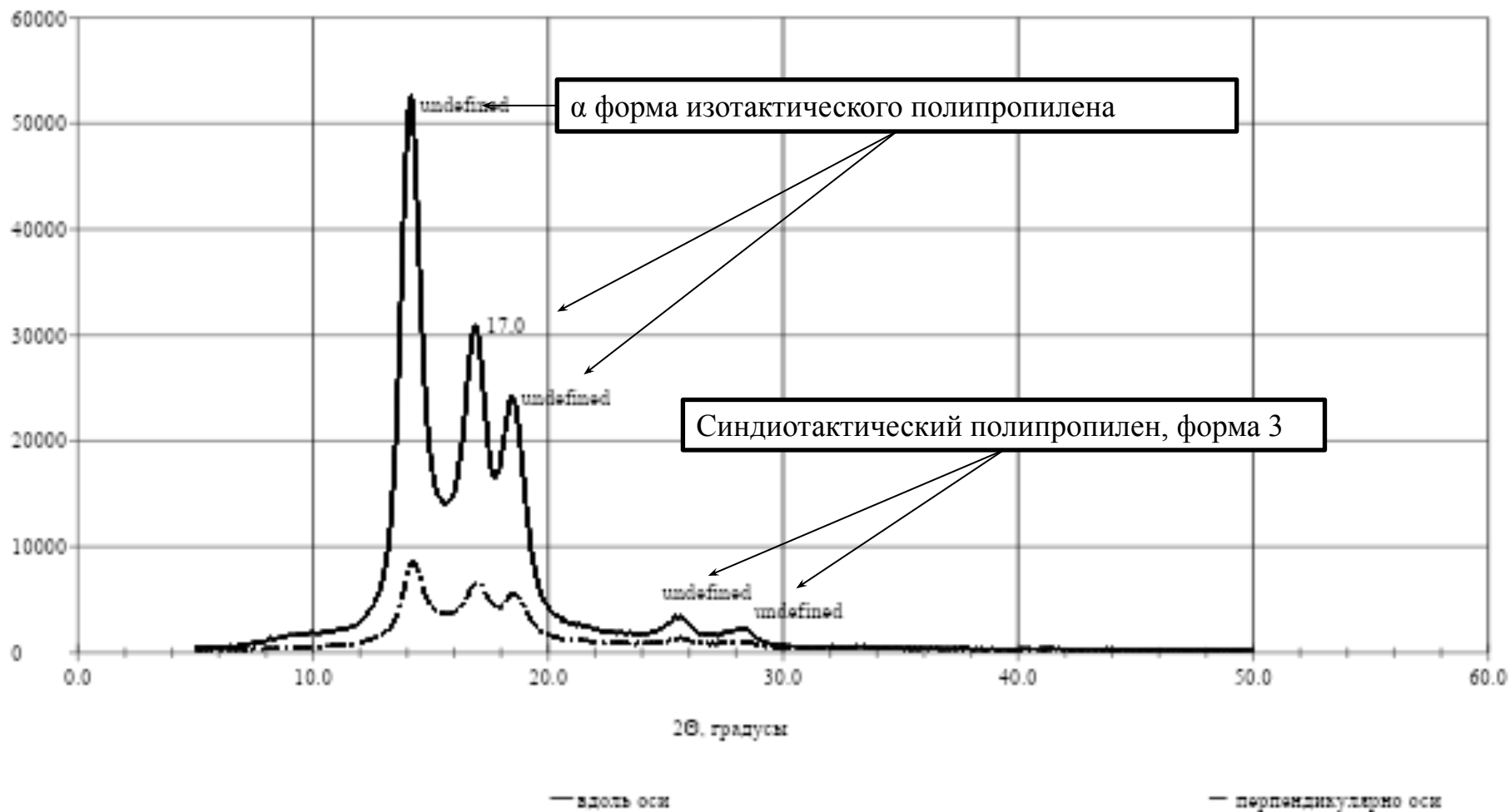
Исследование полимеров

В полимерах различают три основных типа упорядоченности: малый период, шаг спирали (период идентичности вдоль цепи) и большой период.

Малый период - это размеры элементарной кристаллографической решетки, т. е. наименьшего структурного элемента («кирпичика»), путем различных сочетаний которых построены все кристаллические тела.

Шаг спирали - специфическая характеристика макромолекулы определенного химического строения. Особый тип упорядоченности, характерный только для полимеров, связан с чередованием в частично кристаллическом, и в особенности ориентированном, полимере областей большего и меньшего порядка, в пределах - аморфных и кристаллических участков. Появляющиеся при этом так называемые большие периоды характеризуются размерами в сотни ангстрем.

Пример Идентификации при помощи рентгенофазового анализа



Экспериментальные значения

углов

2θ	θ	$\sin(\theta)$	d
14,1	7,05	0,122735	6,28
17	8,5	0,147809	5,21
18,4	9,2	0,159881	4,82
25,5	12,75	0,220697	3,49
28,3	14,15	0,244461	3,15

Табличные значения

Главный пик в широко угловом рентгеновском рассеянии							
изотактический полипропилен				синдиотактический полипропилен			
альфа форма	бета форма	гамма форма	мезоморфная	форма 1	форма 2	форма 3	форма 4
6,26	5,53	6,37	5,99	7,52	7,25	5,58	6,71
5,19	4,17	5,29	4,19	5,6	5,22	4,73	5,27
4,77		4,42		4,7	4,31	3,75	5,03
4,19		4,19		4,31			4,57

	Площадь , мм ²
Общая площадь	183,5581
Площадь кристаллической фазы	76,58828