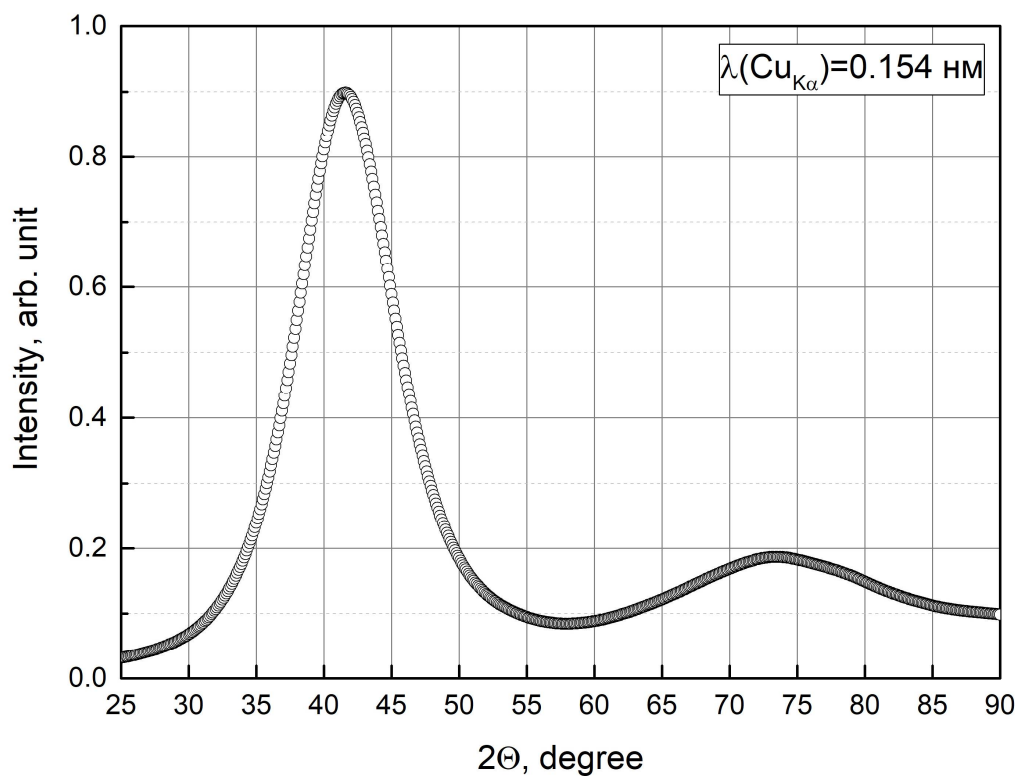


**А.С. Макаров, М.А. Кротова,
Р.А. Кончаков, В.А. Хоник**

ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ ПО РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОМУ АНАЛИЗУ

Часть 2



ВОРОНЕЖ
Воронежский государственный педагогический университет
2018

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

А.С. Макаров, М.А. Кретьова, Р.А. Кончаков, В.А. Хоник

ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ ПО РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОМУ АНАЛИЗУ

Часть 2

*Учебно-методическое пособие по дисциплине
«Физика конденсированного состояния» для студентов
бакалавриата физико-математического факультета,
обучающихся по направлению 44.03.05 «Педагогическое образование»,
профили: «Естествознание / Физика», «Физика / Информатика»*

ВОРОНЕЖ
Воронежский государственный педагогический университет
2018

УДК 538.91
ББК Р22
Л125

*Издано по решению
учебно-методического совета ВГПУ.
Протокол №8 от 12 апреля 2018 г.*

Рецензенты:

доктор физико-математических наук,
заведующий кафедрой экспериментальной физики
профессор *С.Н. Дрождин* (ВГУ);

доктор физико-математических наук,
заведующий кафедрой общей физики,
профессор *А.Ф. Клинских* (ВГУ)

Ответственный редактор:

доктор физико-математических наук,
профессор *В.В. Свиридов* (ВГПУ)

Лабораторные работы по рентгеноструктурному анализу.
Л125 **Часть 2:** учебно-методическое пособие по дисциплине «Физика конденсированного состояния» для студентов бакалавриата физико-математического факультета, обучающихся по направлению 44.03.05 «Педагогическое образование», профили: «Естествознание / Физика», «Физика / Информатика» / А.С. Макаров [и др.]. – Воронеж: Воронежский государственный педагогический университет, 2018. – 108 с.

В учебно-методическом пособии приводится описание порядка выполнения, теоретическое обоснование лабораторных работ, представлены задания и контрольные вопросы к лабораторным работам.

Издание предназначено для студентов бакалавриата физико-математического факультета, обучающихся по направлению 44.03.05 «Педагогическое образование», профили: «Естествознание / Физика», «Физика / Информатика». Материал пособия может быть использован преподавателями вузов в процессе изучения дисциплины «Физика конденсированного состояния».

**УДК 538.91
ББК Р22**

© А.С. Макаров, М.А. Кретьева,
Р.А. Кончаков, В.А. Хоник, 2018
© Воронежский государственный педагогический университет,
редакционно-издательское оформление, 2018

ВВЕДЕНИЕ

Данные лабораторные работы формируют у студентов теоретические представления и практические навыки идентификации и анализа аморфной структуры, на основе рентгенографических данных.

Основной целью выполнения лабораторного практикума является частичное формирование профессиональных и специальных компетенций:

– способность руководить учебно-исследовательской деятельностью обучающихся (ПК-12);

– способность выполнять научные исследования и разработки в области физического и естественнонаучного образования с использованием современных научных методов (СК-2).

При выполнении лабораторных работ рекомендуется придерживаться определенной последовательности действий:

- 1) проведение измерений;
- 2) обработка полученных результатов;
- 3) формулировка выводов и написание отчета.

Выполнение каждой лабораторной работы необходимо начинать с изучения ее описания и приведения знаний в систему, а именно:

– ясно представить себе общую цель данной конкретной лабораторной работы и последовательность задач, решение которых приведет к достижению окончательной цели;

– знать, какое физическое явление изучается в данной работе и какими зависимостями связаны величины его описывающие;

– знать основные особенности объекта исследования;

– изучить и уметь объяснить физические основы используемых в работе методов измерения или расчета искомых величин;

– уметь нарисовать принципиальную схему используемой установки и знать назначение каждого из ее узлов;

– знать последовательность выполнения этапов лабораторной работы;

– иметь общее представление об ожидаемых результатах проводимого эксперимента и суметь выбрать метод, нужный для их математической обработки.

Проверять степень своей готовности к выполнению каждой конкретной работы нужно с помощью приводимых ниже обобщенных контрольных вопросов. Они являются общими для всех работ физического практикума. Поэтому полезно (для экономии времени) не только обязательно отвечать на них, готовясь к работе, но и запомнить

их как общий принцип подхода к выполнению лабораторных работ вообще.

Лабораторные работы оформляются в отдельной тетради. Отчёт о выполнении лабораторной работы включает следующие пункты:

1. Лабораторная работа №, название работы.
2. Цель работы.
3. Оборудование (если есть указания).
4. Схема установки (если есть указания).
5. Основные формулы для расчета.
6. Результаты измерений.
7. Расчеты, графики.
8. Оценка погрешностей (если есть указания).
9. Общие выводы по работе.

Лабораторная работа защищается студентом индивидуально после выполнения экспериментально-практической части в полном объеме.

В процессе защиты студент должен:

- продемонстрировать знание методики выполнения работы и оборудования, используемого в работе;
- показать приемы работы прямо на установке (если есть указания);
- уметь интерпретировать полученные в процессе выполнения работы результаты;
- пояснять выбранный способ обработки результатов и обосновывать сделанные выводы;
- отвечать на каждый из контрольных вопросов по работе.

Защищенная работа отмечается подписью преподавателя и датой защиты.

ОБОБЩЕННЫЕ КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. В чём актуальность проведения данной работы?
2. Какова цель работы?
3. Что представляет собой объект исследования в данной работе?
4. Какие физические явления положены в основу экспериментального метода определения искомой величины (величин)?
5. Какие допущения сделаны в теории метода?
6. Какая теоретическая зависимость может быть проверена в данном конкретном опыте?
7. Какие конкретные задачи в ходе проведения измерений придется решать для достижения цели?

8. Каково назначение отдельных узлов экспериментальной установки?
9. Какие таблицы нужны в протоколе для записи и начальной обработки результатов измерений?
10. Какие зависимости должны быть построены по полученным данным?
11. Какое уравнение (или система) позволяет найти искомую величину или нужную зависимость на основании опытных данных?
12. Какие постоянные (табличные данные, параметры образца и установки) нужны для определения искомой величины по данным опыта?
13. Как будет определена погрешность прямых измерений?
14. Как придется оценивать погрешность конечного результата?
15. Как можно проверить достоверность полученных экспериментальных результатов?
16. Совпадает ли результат эксперимента с предсказанием теории?
17. Чем вызвано расхождение результатов эксперимента и теории?
18. Можно ли сопоставить результаты эксперимента с литературными данными?
19. Достигнута ли цель работы?

Ответы на некоторые из вышеуказанных вопросов рекомендуется отразить в отчете о выполнении лабораторной работы.

Лабораторная работа №1. «Определение радиуса первой координационной сферы в структуре металлических стекол»

Цель: определить основные параметры, характеризующие интерференционную картину, возникающую при дифракции рентгеновских лучей в аморфных металлических материалах.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

1. Определение аморфного состояния

«Аморфное состояние – одна из форм существования твердых тел. Можно сформулировать следующее определение: веществом в аморфном состоянии называется твердое некристаллическое вещество».

Аморфное состояние твердого тела характеризуется отсутствием трансляционного дальнего порядка (не наблюдается корреляции между положениями атомов на больших расстояниях) при сохранении ближнего порядка, т.е. наличия корреляции в расположении ближайших атомов. Ближний порядок в аморфных материалах проявляется в нескольких (максимум – двух или трех) координационных сферах. Координационная сфера – это атомы, окружающие данный атом (обычно в молекуле или кристалле) в определенном интервале расстояний от него. Другими словами, в аморфных материалах расстояния между соседними атомами близки к средним значениям, поэтому считается, что в аморфных телах реализуется ближний порядок в расположении атомов.

Один из видов аморфных веществ в твердом состоянии получается при переохлаждении жидкости в условиях, когда кристаллизация не успевает осуществиться до перехода вещества в твердое состояние. Такие материалы именуется стеклами. Согласно определению Комиссии по терминологии АН СССР (1932г.) «стеклом называются все аморфные тела, получаемые путем переохлаждения расплава независимо от их состава и температурной области затвердевания и обладающие в результате постепенного увеличения вязкости механическими свойствами твердых тел, причем процесс перехода из жидкого состояния в стеклообразное должен быть обратимым».

В большинстве аморфных материалов подвижность структурных элементов является столь малой, что скорость кристаллизационных процессов стремится к нулю, и вещество сохраняется в твердом аморфном состоянии сколь угодно долгое время. А тот факт, что стекла получают в ходе переохлаждения жидкости, говорит о том, что структура аморфного вещества должна быть очень близкой к структуре жидкости, из которой это вещество получено.

2. Способы получения аморфных металлов

Аморфные металлы получают различными методами: осаждения из газовой фазы или жидкого раствора, ионной имплантации и др. Однако самым распространённым является метод закалки расплава, позволяющий получать аморфные сплавы в виде изолированных ленточных, проволочных, а иногда и массивных образцов в широком интервале составов.

В методах осаждения из газовой фазы атомы или ионы металла (получаемые термическим испарением, катодным распылением и т.п.) осаждаются в вакуумной камере на охлаждаемую до низких температур подложку. В результате получаем тонкую аморфную плёнку толщиной до 10...100 нм. При этом плёнка оказывается загрязнена атомами остаточных газов, которые неизбежно присутствуют в вакуумной камере. В случае использования термического испарения так удаётся получить в аморфном состоянии даже чистые металлы. Использование скоростного плазменного осаждения позволяет увеличить толщину плёнки до нескольких миллиметров и повысить её чистоту.

При ионной имплантации поверхность обычного кристаллического металла облучают ионами, которые внедряются в неё и при достаточно больших дозах (по меньшей мере одно смещение на атом) и могут нарушать кристаллический порядок. Бомбардировка собственными ионами не создаёт стабильной аморфной структуры, однако при имплантации ионов элементов, стабилизирующих аморфное состояние (например, фосфора), можно получить на поверхности тонкий – менее 1 мкм – аморфный слой.

Получение аморфизированных металлических слоев с помощью лазерной обработки. Процесс получения аморфной структуры осуществляется путем взаимодействия вещества за короткий период времени с лазерным излучением с высокой плотностью энергии. Основная часть энергии лазерного излучения ($\sim 10^3 - 10^{10}$ Вт/см², в зависимости от материала) расходуется на быстрое расплавление поверхностного слоя вещества. Вследствие кратковременности процесса основная масса материала остается не нагретой. Сохранение холодной поверхности на границе контакта с тонким слоем расплава приводит к охлаждению со скоростями $10^5 - 10^8$ К/с. При «быстром» расплавлении возникает весьма однородная жидкость, которая после затвердевания превращается в «стекло» с необычными физическими свойствами. Процесс образования на поверхности металлических материалов подобной структуры получил название «лазерного стеклования».

Аморфизация электроискровым разрядом. Суть этого метода заключается в том, что поток энергии, сконцентрированный в канале искрового разряда, за короткий промежуток времени ($\sim 10^{-3}$ с) выделяется и расплавляет поверхностные участки материала на глубину до 3 – 5 мкм.

Распыление электрическим полем. Если между поверхностью жидкого расплава и какой-либо поверхностью создать достаточно сильное электрическое поле, то на поверхности расплава возникает острый выступ, который может испускать как поток ионов атомов расплава, так и капли размером от 0.1 до 20 мкм, которые быстро охлаждаются с образованием АМС. Этот метод можно использовать для создания аморфных покрытий и порошков.

Метод получения непрерывных тонких аморфных лент. В 1970 г. появилась основная технология получения непрерывных аморфных металлических лент: методы центробежной закалки и закалки в валках (прокатки расплава). Именно тогда, наряду с появлением возможности получения лент, было впервые обнаружено, что сплавы, хрупкие в кристаллическом состоянии, при аморфизации приобретают повышенную пластичность и прочность. Аморфное состояние оказалось в центре все более нарастающего внимания исследователей. После 1970 г. появились многочисленные составы металлических стекол и были обнаружены их уникальные свойства.

В 1976 г. Либерман (Н. Liebermann) и Грэм (С. Graham) разработали новый метод изготовления тонких ленточных МС на переохлаждающемся быстровращающемся медном колесе (supercooled fast – spinning wheel). В настоящее время эта методика называется одновалковым спиннингованием. Скорость охлаждения расплава, реализуемая по этой методике, достигает $\sim 10^6$ К/с. В результате получают ленты (ribbons), фольги (foils) и проволоки (wires), толщина которых менее ста микрометров. Несмотря на ограниченность размеров такие стекла все же находят области применения. В последствии были разработаны методы создания так называемых массивных МС (Bulk MGs), имеющих толщину более 1 мм.

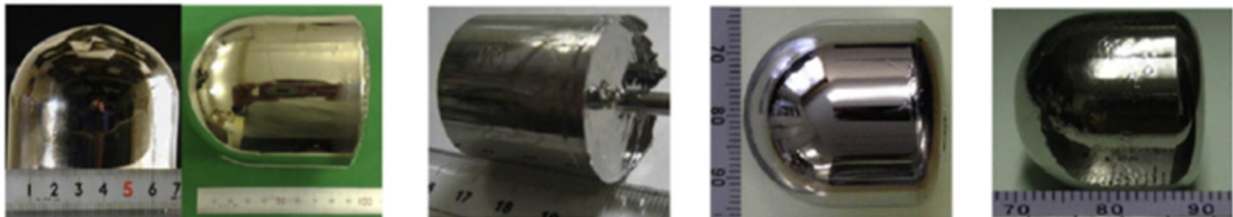


Рис. 1.1. Массивные металлические стекла различной формы, основанные на металлах Pt, Pd, Ni и Zr.

Как видно, перечисленные методы позволяют получать аморфные сплавы в виде тонких плёнок, поверхностных слоёв или массивных образцов в довольно широком диапазоне составов.

3. Методы исследования аморфной структуры

Для исследования аморфных структур используют различные методы. Эти методы необходимы для изучения различных видов аморфных веществ.

Каждый из описанных методов позволяет исследовать свою область знаний об аморфной структуре.

Одним из методов исследования аморфной структуры является метод малоуглового рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов. Важнейшей особенностью метода малоуглового рассеяния является возможность изучения неоднородностей в структуре разупорядоченных систем, какими и являются металлические стекла. В абсолютно однородной среде малоугловое рассеяние отсутствует, и картина рассеяния заметно меняется при появлении в структуре каких-либо неоднородностей электронной плотности. Исследования эволюции картины малоуглового рассеяния позволяет установить как появление неоднородностей в структуре, так и их изменение (количество, размер, возможное распределение по размерам, относительное изменение электронной плотности по сравнению с матрицей и т.д.). Применение метода малоуглового рассеяния дает возможность анализа структуры аморфных фаз.

Следующий метод исследования — это метод дифракции электронов (ДМЭ, ДБЭ). Метод дифракции медленных электронов (ДМЭ) основан на анализе дифракционных картин электронов с энергией 30–200 эВ, упруго рассеянных от исследуемого участка поверхности. В методе дифракции быстрых электронов (ДБЭ) используются электроны с энергией 5–100 кэВ, упруго рассеянных от исследуемой поверхности под скользящими углами. Методы ДМЭ и ДБЭ позволяют оценить структурное совершенство поверхности; определить обратную решетку поверхности из геометрии дифракционной картины; оценить морфологию поверхности по профилю дифракционного рефлекса; определить атомную структуру поверхности путем сравнения зависимостей интенсивности дифракционных рефлексов от энергии электронов, рассчитанных для структурных моделей, с зависимостями, полученными в эксперименте; контролировать послойный рост эпитаксиальных пленок с атомарной точностью.

Метод протяженной тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (Extended X-ray Absorption Fine Structure, сокращенно EXAFS) позволяет исследовать локальную атомную структуру, а именно межатомные расстояния, координационные числа для ближайшего атомного окружения. Однако, существуют определенные сложности в математической обработке осциллирующих частей EXAFS-спектров, особенно если химические элементы расположены достаточно близко в периодической системе элементов. EXAFS-спектроскопия используется для изучения ближнего окружения примесных атомов в кристаллах, также метод позволяет получать информацию о ближнем порядке неупорядоченных систем.

Метод мессбауэровской спектроскопии (ядерный γ -резонанс) позволяет получать информацию о топологическом и композиционном ближних порядках в твердом теле. Используя метод мессбауэровской

спектроскопии возможно анализировать широкий спектр характеристик структуры–фазовый состав и кристаллическую структуру, магнитные свойства вещества, получать информацию о валентных состояниях, электронном обмене, диффузии и других характеристиках.

Важное место в исследовании аморфных металлических сплавов (АМС) занимает метод просвечивающей электронной микроскопии, поскольку он основан на прямом наблюдении структуры материала. Методом ПЭМ в структуре АМС могут быть визуализированы неоднородности с размерами от нескольких ангстрем. Основными причинами возникновения структурных неоднородностей в АМС являются экстремальные условия формирования аморфного состояния и внешние воздействия – термообработка, механические воздействия, радиационное облучение и др.

Основным методом исследования аморфной структуры является метод рентгенографии. Метод рентгенографии исследует строение тел, который использует явление дифракции рентгеновских лучей. Также это метод исследования структуры вещества по распределению в пространстве и интенсивностям рассеянного на анализируемом объекте рентгеновского излучения. В этом методе дифракционная картина зависит от длины волны используемых рентгеновских лучей и строения объекта. Для исследования атомной структуры применяют излучение с длиной волны $\sim 1 \text{ \AA}$, т.е. порядка размеров атома.

Длины волн рентгеновских лучей, используемых в практических целях, лежат в пределах от нескольких ангстрем до долей ангстрема (\AA), что соответствует энергии электронов, вызывающих рентгеновское излучение от 10^3 до 10^5 эВ.

Положение диффузного максимума зависит от химического состава сплава и связано с радиусом первой координационной сферы r_1 соотношением Эренфеста:

$$2r_1 \sin \theta_{1\max} = 1,23\lambda, \quad (1.1)$$

где λ – длина волны используемого излучения, $\theta_{1\max}$ – дифракционный угол, соответствующий положению первого диффузного максимума.

Положения максимумов интенсивности рассеяния определяют радиус первой координационной сферы r_1 , причем

$$r_1 = \frac{7,73}{Q_{1\max}} = \frac{14,06}{Q_{2\max}} = \frac{20,46}{Q_{3\max}} \dots, \quad (1.2)$$

где $Q_{(k)\max}$ – волновой вектор, соответствующий первому (второму, третьему, ...) максимуму кривой интенсивности, k – порядок максимума кривой интенсивности.

Волновой вектор с коэффициентом, соответствующий первому, (второму, третьему...) максимуму кривой интенсивности можно рассчитать с помощью соотношения:

$$Q_{(k)\max} = 4\pi(\sin \theta_{(k)\max} / \lambda) \quad (1.3)$$

где k – порядок максимума кривой интенсивности, $\theta_{(k)\max}$ – угол рассеяния, соответствующий первому, второму, третьему и т.д. максимуму кривой интенсивности, λ – длина волны используемого излучения.

Так как положение диффузного максимума зависит от химического состава сплава, то основываясь на значении радиуса первой координационной сферы можно приближенно оценить плотность данного вещества с помощью соотношения:

$$\rho = \frac{M}{V_\mu} = \frac{M}{VN_a} = \frac{M}{4/3 \cdot \pi \cdot r_1^3 N_a} \quad (1.4)$$

где M – молярная масса, V_μ – молярный объем, r_1 – радиус первой координационной сферы, N_a – число Авогадро.

ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. а) По изображению дифрактограммы, представленной в приложении №1, определите угловые положения для каждого дифракционного максимума 2θ .

б) вычислите углы $\theta_{1\max}$ и $\theta_{2\max}$, полученные значения запишите в таблицу 1.1.;

в) вычислите $\sin \theta_{1\max}$ и $\sin \theta_{2\max}$, полученные значения запишите в таблицу 1.1.;

г) запишите значение длины волны λ , приведенное на дифрактограмме в таблицу 1.1.

2. По положению первого диффузного максимума дифракционной картины определите радиус первой координационной сферы r_1 с помощью соотношения (1.1). Результаты вычислений занесите в таблицу 1.1.

3. Рассчитайте волновые вектора $Q_{1\max}$ и $Q_{2\max}$, соответствующий первому и второму максимуму интенсивности с помощью соотношения (1.2). Результаты вычислений занесите в таблицу 1.2.

4. Рассчитайте волновой вектор $Q_{(k)\max}$ с коэффициентом, соответствующий первому и второму максимуму интенсивности с помощью соотношения (1.3). Результаты вычислений занесите в таблицу 1.2. Полученный результат соотнесите с результатом, рассчитанным при помощи соотношения (1.2).

5. С помощью соотношения (1.4), рассчитайте плотность данного вещества. Результаты вычислений занесите в таблицу 1.1.

6. Рассчитайте погрешности. Полученные результаты соотнесите с результатом, полученные в ходе выполнения работы.

Табл.1.1.

№ п/п	$\theta_{1\max}$, рад	$\theta_{2\max}$, рад	$\sin \theta_{1\max}$	$\sin \theta_{2\max}$	λ , Å	r_1 , Å	ρ , кг/м ³
1							
2							
3							

Табл.1.2.

№ п/п	По формуле (1.2)		По формуле (1.3)	
	$Q_{1\max}$	$Q_{2\max}$	$Q_{1\max}$	$Q_{2\max}$
1				
2				
3				

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Дайте определения кристаллического и аморфного состояния твердого тела.
2. Сформулируйте понятия ближнего и дальнего порядка в расположении атомов.
3. Какие виды получения аморфных веществ в твердом состоянии вам известны?
4. Объясните физический смысл метода рентгенографии? В чем его преимущество?
5. Почему метод рентгенографии является одним из основных методов исследования аморфной структуры?
6. От каких параметров зависит дифракция рентгеновских лучей?
7. Какой физический смысл имеет радиус координационной сферы?
8. С помощью каких методов можно определить радиус координационной сферы?
9. Какой физический смысл имеет угловое положение дифракционного максимума?
10. От каких параметров зависит положение диффузного максимума дифракционной картины?

Лабораторная работа №2. «Определение размеров областей когерентного рассеяния в структуре металлических стекол»

Цель: определить протяженность локальных областей среднего порядка в структуре металлических стекол при анализе экспериментальных рентгенографических данных.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

В последние годы значительное внимание уделяется исследованию аморфных материалов. Это обусловлено тем, что такие обладают уникальными физико-химическими свойствами.

Физические свойства материалов определяются их атомной структурой. Отличительным признаком структуры кристаллов является дальний порядок или трансляционная симметрия, существование которой подразумевает строгий порядок в расположении атомов в отдельных частях кристалла любых размеров. Отступление от этого порядка рассматривается как дефект кристаллической решетки.

В неупорядоченных (аморфных, стеклообразных) материалах, в отличие от кристаллических, отсутствует дальний порядок во взаимном расположении атомов. Однако расположение атомов в аморфном веществе не является совершенно случайным, структура аморфного полупроводника сохраняет ближний и средний порядок. Введем понятие ближнего порядка: ближним порядком (БП) называют локальное расположение атомов вокруг некоторого атома, взятого за начало отсчета. БП определяется химической природой атомов, образующих данное вещество (валентностью, длиной и углом химической связи). Область ближнего порядка включает в себя атомы, которые являются ближайшими соседями атома, выбранного за центральный (который находится от него на минимальном расстоянии), и входящие в так называемую первую координационную сферу. Параметрами БП являются: число ближайших соседних атомов (первое координационное число); расстояние от этих атомов до рассматриваемого атома (длина связи, радиус первой координационной сферы), а также их угловое распределение. Таким образом, параметры БП помимо первой координационной сферы частично определяют вторую.

Введение понятия ближнего порядка не позволяет полностью описать наблюдаемое в неупорядоченных системах локальное упорядочение в расположении атомов, так как оно не отвечает на вопрос, каким образом области ближнего порядка соединены друг с другом, и не объясняет значительную протяженность упорядоченных областей в некристаллических материалах. Расположение атомов в аморфном

веществе не является совершенно случайным, структура аморфного материала сохраняет не только ближний, но и средний порядок. Под средним порядком понимают межатомные корреляции или определенные закономерности во взаимном расположении атомов на расстояниях, которые превышают радиусы первых координационных сфер, т.е. за пределами ближнего порядка.

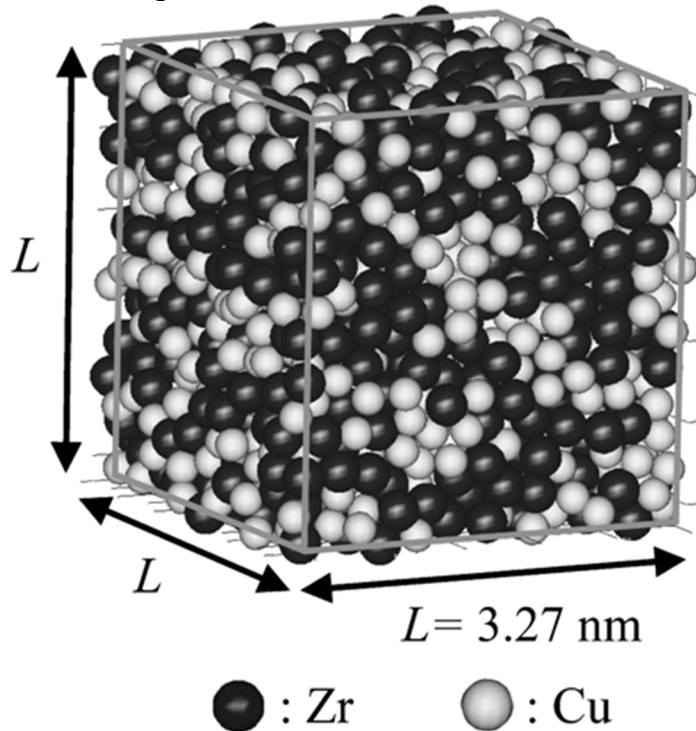


Рис. 2.1. Компьютерная модель структуры металлического стекла $Zr_{50}Cu_{50}$.

На рис. 2.1. показана компьютерная модель структуры металлического стекла $Zr_{50}Cu_{50}$, иллюстрирующая взаимное расположение атомов Zr и Cu в пространстве.

С помощью такого понятия как функция радиального распределения атомов (ФРРА) можно описать радиальное распределение атомов. Графические кривые зависимостей ФРРА для разных агрегатных состояний вещества представлены на рис. 2.2.

Из рис. 2.2. видно, что в случае идеального газа $g(r)$ стремится к единице, что соответствует однородному распределению и отсутствию ближнего и дальнего порядка. В случае жидкости появляются несколько пиков, которые соответствуют ближнему порядку. В случае с кристаллом наблюдаются «острые» пики, расположенные на некотором расстоянии друг от друга и простирающиеся на большие расстояния, что указывает на наличие дальнего порядка в расположении атомов системы.

Одним из самых востребованных методов исследования структуры аморфных материалов является метод рентгеновского структурного анализа. Многочисленные экспериментальные данные, которые были

получены дифракционными методами, показали, что в аморфных материалах существует упорядочение в масштабах ближнего и так называемого среднего порядка. Основным свидетельством этого факта считается первый дифракционный максимум в распределении интенсивности дифракции рентгеновских лучей $I(2\theta)$.

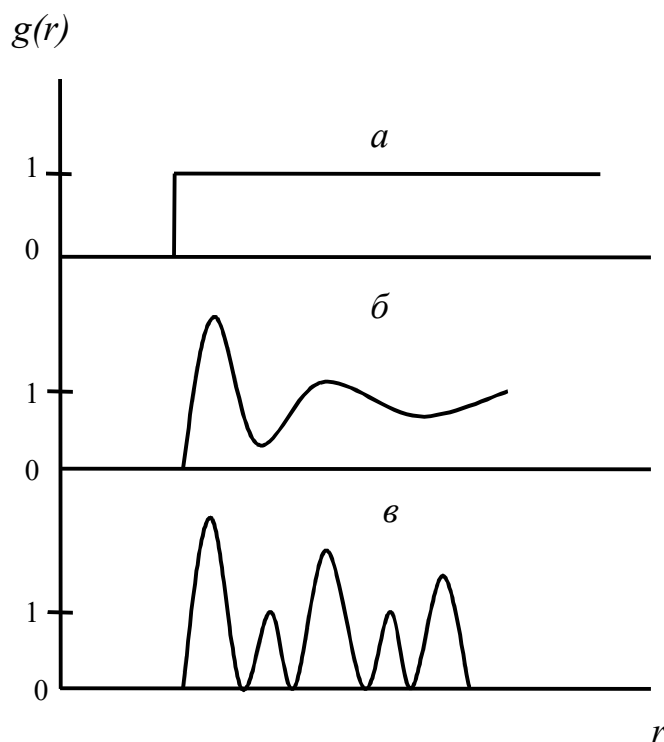


Рис. 2.2. Типичный вид ФРРА для идеального газа (*a*), жидкости или аморфного твердого тела (*б*), кристалла (*в*).

В кристаллографии широко известно понятие области когерентного рассеяния (ОКР). Такой областью называют минимальный по своему размеру конгломерат атомов, имеющий правильное кристаллическое строение, на котором рентгеновские лучи рассеиваются когерентно, то есть с постоянной разностью фаз. Рентгенографические методы определения размеров ОКР основаны на анализе ширины дифракционных линий кристаллов с помощью соотношения Селякова-Шеррера. Однако, такой метод определения размеров ОКР достаточно приближенный.

Из формулы Селякова-Шеррера также можно приближенно оценить протяженности локальных областей среднего порядка в структуре металлических стекол L при помощи соотношения:

$$L = \frac{\lambda}{\beta \cos \theta}, \quad (2.1)$$

где λ – длина волны рентгеновского излучения, β – интегральная ширина на дифрактограмме в радианах (для шкалы 2θ), θ – дифракционный угол.

Интегральную ширину мы можем вычислить по формуле:

$$\beta = \frac{I_{\text{инт}}}{I_{\text{макс}}} = \frac{\int_{2\theta_1}^{2\theta_2} I(2\theta)d(2\theta)}{I_{\text{макс}}}, \quad (2.2)$$

где $I_{\text{инт}}$ – интегральная интенсивность, $I_{\text{макс}}$ – максимальная интенсивность пика, $I(2\theta)$ – кривая распределения интенсивности в области углов, соответствующий началу пика ($2\theta_1$) и окончанию пика ($2\theta_2$), 2θ – дифракционный угол.

В случае отсутствия аналитического вида функции распределения интенсивности в области углов, соответствующий началу пика ($2\theta_1$) и окончанию пика ($2\theta_2$) можно от интегральной формулы перейти к сумме конечных приращений функции:

$$\beta = \frac{I_{\text{инт}}}{I_{\text{макс}}} = \frac{\sum I(2\theta_j)\Delta 2\theta}{I_{\text{макс}}}. \quad (2.3)$$

Графическая иллюстрация определения значений $I(2\theta_j)$ и $\Delta 2\theta$ приведена на рис. 2.3, где показан профиль линий дифрактограммы аморфного материала.

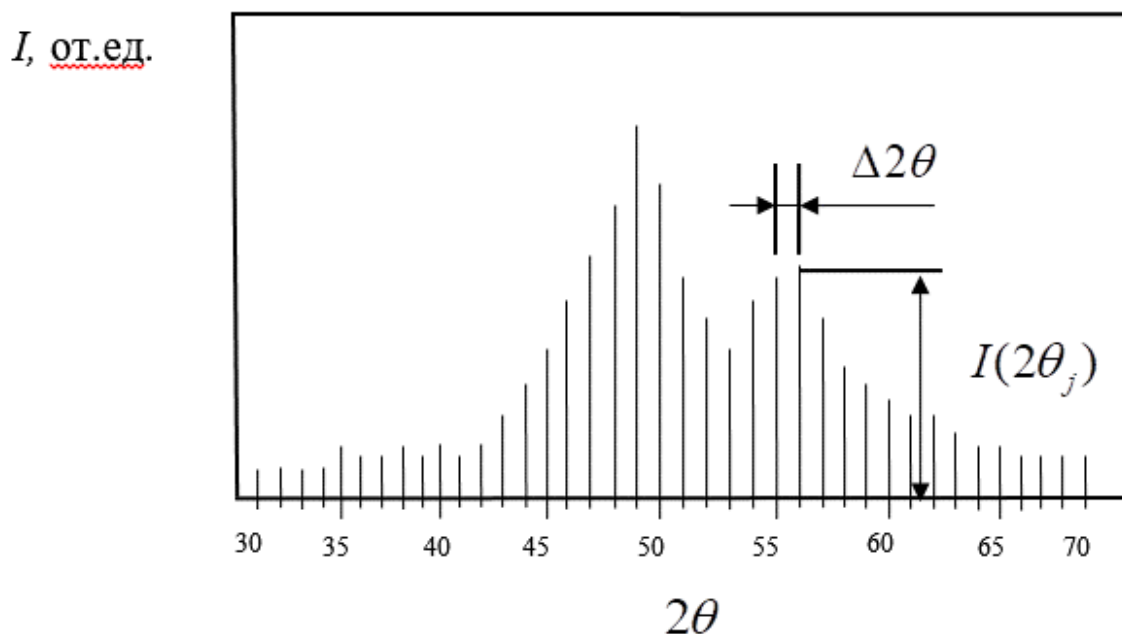


Рис. 2.3. Профиль линии (каждый вертикальный отрезок показывает число рентгеновских квантов, зарегистрированных на соответствующем значении угла).

ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. По изображению дифрактограммы, представленной в приложении №1, рассчитайте $\sum_j I(2\theta_j)\Delta 2\theta$ в области углов, соответствующих началу и окончанию первого диффузного пика интенсивности.
 2. Определите максимальную интенсивность первого диффузного пика $I_{\text{макс}}$.
 3. При помощи соотношения (2.3) рассчитайте интегральную ширину β .
 4. Запишите длину волны рентгеновского излучения λ , приведенную на дифрактограмме.
 5. Рассчитайте усредненную протяженность локальных областей среднего порядка при помощи соотношения (2.1).
- В ходе расчетов необходимо учитывать важность перевода используемых значений в нужные единицы измерения.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. В чем отличие структуры кристалла от структуры аморфного материала.
2. Охарактеризуйте понятие ближнего порядка.
3. Назовите основные параметры ближнего порядка.
4. Охарактеризуйте понятие среднего порядка.
5. Понятие функции радиального распределения атомов (ФРРА).
6. Опишите радиальное распределение частиц для разных агрегатных состояний вещества.
7. Схематично изобразите и охарактеризуйте ФРРА для идеального газа, жидкости, аморфного твердого тела и кристалла.
8. Перечислите основные методы, используемые для идентификации структуры аморфных материалов.
9. Назовите самый распространённый метод идентификации аморфной структуры.
10. Объясните физический смысл величин, фигурирующих в формуле Сеякова-Шеррера?

Лабораторная работа №3. «Анализ углового распределения интенсивности рассеянного рентгеновского излучения металлическими стеклами»

Цель: рассчитать структурный фактор, основываясь на экспериментальных рентгенографических данных аморфных металлов и средних значениях интенсивности рассеяния электронами.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Рентгенография и другие дифракционные методы дают наиболее точные сведения о структуре кристаллических материалов, однако с их помощью можно изучать строение и менее упорядоченных систем – полимеров, жидких кристаллов, аморфных тел, жидкостей и газов. Ввиду отсутствия дальнего порядка у конденсированных некристаллических систем оказывается практически невозможным вычислять для них амплитуды рассеяния, однако непосредственное вычисление интенсивности рассеяния осуществимо.

Рентгеновские лучи являются электромагнитными волнами, поэтому они должны рассеиваться заряженными частицами. Известно, что фотоны электромагнитного излучения обладают одновременно волновыми и корпускулярными свойствами. Исходя из корпускулярных свойств фотона следует, что при их упругом столкновении с заряженными частицами, происходит испускание фотонов с той же частотой, а при неупругом столкновении – происходит уменьшение частоты рассеянной волны. Волновые же свойства предполагают преломление, отражение, рассеяние, дифракцию и поляризацию. Отсюда следует, что, обладая свойствами и частиц, и волн, рентгеновские лучи испытывают два типа рассеяния – когерентное и некогерентное рассеяние.

Когерентное рассеяние – это рассеяние излучения с сохранением частоты и с фазой, которая отличается на $3,14 (\pi)$ от фазы первичного излучения. Отсюда, рассеянная волна может интерферировать с падающей волной или другими когерентно рассеянными волнами.

Некогерентным рассеянием называют рассеяние, при котором энергия частиц рассеиваемых фотонов оказывается меньше энергии квантов первичного пучка. Соответственно, длина рассеиваемой волны в этом случае будет отличаться от длины волны падающего излучения, а их фазы никак не будут связаны между собой. Таким образом, некогерентное излучение не интерферирует с когерентно рассеянным и первичным излучениями.

При рентгеноструктурном анализе кристаллических веществ обычно используется когерентно рассеянное излучение, а некогерентное чаще всего является мешающим фоном дифракционного профиля интенсивности.

Некристаллические материалы характеризуются ближним порядком, которых заключается в правильном расположении возле фиксированного атома, иона строго определенного числа ближайших соседей. Рентгенографический метод исследования атомной структуры аморфных тел основывается на анализе углового распределения интенсивности рассеянного рентгеновского излучения. Рентгеновское излучение рассеивается электронами атомов аморфных материалов. Процесс рассеяния не характерен обычному отражению или преломлению. Рентгеновское излучение, взаимодействуя с электронами, приводит их в колебательное движение. Колебаясь с той же частотой, что и электрический вектор первичной электромагнитной волны, электроны порождают вторичное электромагнитное излучение, распространяющееся во всех направлениях.

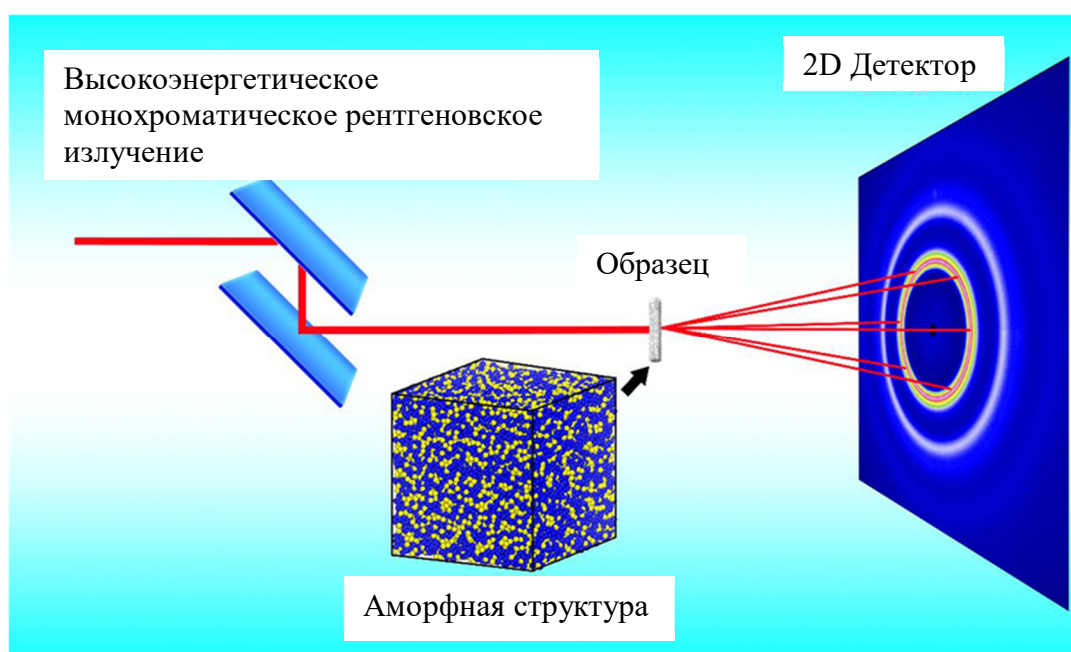


Рис. 3.1. Схема установки по дифракции высокоэнергетического (порядка 100 кэВ) рентгеновского излучения на аморфном сплаве.

Интенсивность можно вычислить, зная совокупность межатомных расстояний в объекте, но не зная координат атомов. Это очень важно для большинства некристаллических веществ, ибо в них как раз трудно указать расположение атомов, но можно задавать функции, статистически описывающие все возможные межатомные расстояния. Интенсивность рассеянного излучения, фиксируемая в некоторой точке, пропорциональна электронной плотности атомов.

На рис 3.1. представлена схема установки по дифракции высокоэнергетического (порядка 100 кэВ) рентгеновского излучения на аморфном сплаве. Такого рода эксперименты обычно проводятся при температурах образца равной комнатной.

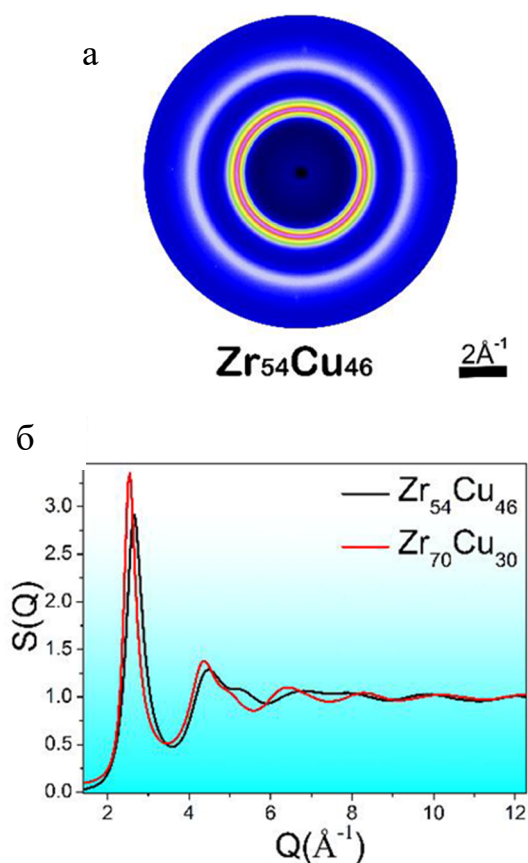


Рис. 3.2. (а) двумерная дифракционная картина аморфных образцов Zr-Cu; (б) структурный фактор $S(Q)$.

На рис. 3.2. показана двумерная рентгенограмма металлического стекла $Zr_{54}Cu_{46}$ (а) и структурный фактор (б) для двух металлических стекол $Zr_{54}Cu_{46}$ и $Zr_{70}Cu_{30}$. Видно, что структурные факторы близких по химическому составу металлических стекол имеют разительные отличия в угловом положении и величине. Этот факт свидетельствует в пользу высокой чувствительности рентгенографических исследований структуры металлических стекол. Некристаллическая структура исследуемых образцов металлических стекол Zr-Cu подтверждается отсутствием на двумерной дифракционной картине четких окружностей, линии или точек, свидетельствующих о присутствии резких Брэгговских пиков, характерных для дифракционных данных поликристаллических или

монокристаллических образцов. Структурный фактор $S(Q)$ можно определить из двухмерной дифракционной картины.

Рассеяние конденсированными некристаллическими системами зависит от характера их локальной упорядоченности и симметрии. Структура и размытие функции интенсивности рассеяния будут отражать и анизотропию упорядоченности – интерференционные пики «острее» в тех направлениях, в которых объект более упорядочен, и размыты в тех, в которых он менее упорядочен.

Многочисленные экспериментальные данные, полученные дифракционными методами, а также результаты математического моделирования структуры показали, что в аморфных материалах существует упорядочение в масштабах ближнего порядка. Основным свидетельством этого факта считается первый резкий дифракционный максимум (first sharp diffraction peak – FSDP) в распределении интенсивности дифракции рентгеновских лучей, электронов или нейтронов.

Для построения структурного фактора рассеяния необходимы данные угловой зависимости интенсивности рассеяния рентгеновских лучей $I(Q)$. Параметр Q определяется длиной волны и углом рассеяния с помощью соотношения:

$$Q = (4\pi / \lambda) \sin \theta, \quad (3.1)$$

где θ – угол рассеяния, λ – длина волны излучения. С другой стороны, параметр Q связан с волновым вектором \vec{k} рассеянной волны соотношением

$Q = 2|\vec{k}|\sin \theta$. Экспериментальная зависимость интенсивности рассеяния рентгеновских лучей $I_{ex}(Q)$ получается в относительных единицах, поэтому для перехода к абсолютным электронным единицам (э.е.) необходимо провести нормировку, цель которой сводится к нахождению множителя m из соотношения:

$$I(Q) = m \cdot I_{ex}(Q). \quad (3.2)$$

Уравнение (3.2) удовлетворяет условию

$\int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} m \cdot I_{ex}(Q) \cdot Q^2 dQ = \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} \sum_{j=1}^n f_j^2(Q) \cdot Q^2 dQ$, которое позволяет отыскать

абсолютное значение множителя m с помощью соотношения:

$$m = \left[\int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} \sum_{j=1}^n f_j^2(Q) \cdot Q^2 dQ \right] / \left[\int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} I_{ex}(Q) \cdot Q^2 dQ \right], \quad (3.3)$$

где f_j – фактор рассеяния атомом j -го сорта.

Следует отметить, что нормировка $I_{ex}(Q)$ проводится во всем экспериментальном диапазоне значений Q , который в силу ограниченности

условий дифракционного эксперимента, имеет свой нижний Q_{\min} и верхний Q_{\max} предел. Физический смысл выражения согласно определению Вайнштейна, состоит в том, что интерференция, имеющая место при некотором взаимном расположении атомов, не может изменить суммарной интенсивности рассеяния этими атомами, а дает лишь перераспределение интенсивности (разумеется, речь идет только о когерентном рассеянии).

Для примера на рис. 3.3, представлена нормированная угловая зависимость $I(Q)$, осциллирующая около кривой $f^2(Q)$.

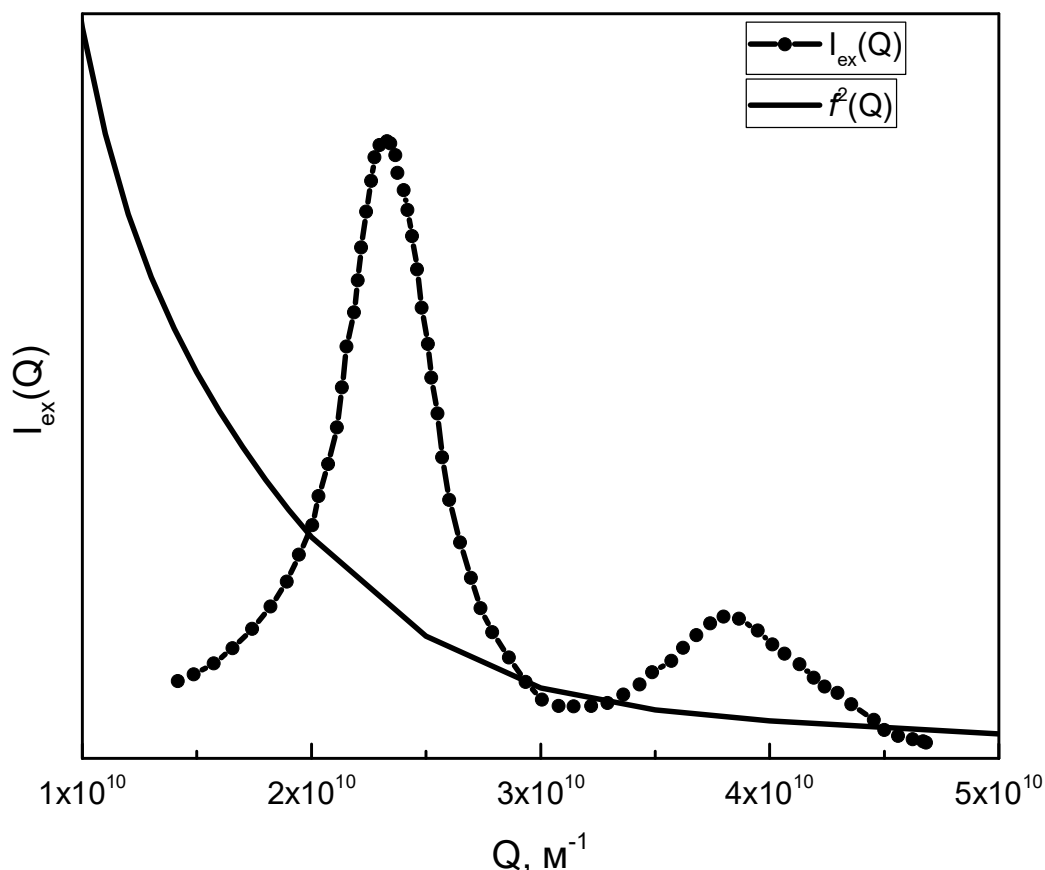


Рис. 3.3. Угловая зависимость экспериментальной интенсивности рассеяния рентгеновских лучей $I_{ex}(Q)$, представленная в относительных единицах нормированная к атомному фактору рассеяния $f^2(Q)$.

Для описания некристаллической структуры и структурно-чувствительных свойств аморфных материалов используется не вся интенсивность рассеяния, а лишь ее интерференционная часть, называемая структурным фактором. Числовые значения структурного фактора $S(Q)$ равны отношению наблюдаемой интенсивности когерентного рассеяния к интенсивности независимого рассеяния того же числа атомов:

$$S(Q) = \frac{I(Q)}{\sum_{j=1}^n f_j^2(Q)}, \quad (3.4)$$

ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. Используя экспериментальные данные угла рассеяния рентгеновских лучей (приложение №1), рассчитайте величины векторов обратного пространства Q с помощью соотношения (3.1). Длина волны используемого излучения $\lambda = 0,154$ нм.
2. Запишите экспериментальные значения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей (приложение №2) как функцию вектора обратного пространства $I_{ex}(Q)$.
3. Рассчитайте коэффициент нормировки m с помощью соотношения (3.3), используя данные $I_{ex}(Q)$ и атомные факторы химических элементов (приложение №3).
4. Рассчитайте абсолютные значения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей $I(Q)$ при помощи соотношения (3.2).
5. С помощью соотношения (3.4) рассчитайте значения структурного фактора $S(Q)$. Расчет суммы $\sum_{j=1}^n f_j^2(Q)$ выполняется следующим образом.
Сначала для данного значения Q вычисляется параметр $\sin(\theta)/\lambda$, а затем из таблиц приложения №3 находят значение $f_j(Q)$ для каждого химического элемента, входящего в состав МС. Если значение параметра $\sin(\theta)/\lambda$ слишком мало и отсутствует в таблицах, то вычисляется параметр $\sin(\theta/2)/\lambda$ и по его значению из тех же таблиц приложения №3 берутся значения $f_j(Q)$.
6. Постройте графическую зависимость структурного фактора $S(Q)$. Для построения этой зависимости рекомендуется выбрать не менее 12–15 значений параметра Q , приблизительно равномерно распределенных по всему интервалу его изменения.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Какие типы рассеяния испытывает рентгеновское излучение на некристаллическом веществе.
2. Охарактеризуйте понятие когерентного рассеяния.
3. Охарактеризуйте понятие некогерентного рассеяния.

4. Какими методами выполняются исследования атомной структуры аморфных тел.
5. Можно ли рассчитать интенсивность рассеяния рентгеновского излучения на некристаллической структуре?
6. Опишите физический принцип возникновения дифракции рентгеновского излучения на некристаллической структуре.
7. На основании каких экспериментальных фактов можно сказать, что в аморфных материалах наблюдается ближний порядок.
8. Охарактеризуйте понятие структурного фактора рассеяния?
9. Приведите примеры веществ, находящихся в некристаллическом состоянии?
10. Какой вид имеет структурный фактор рассеяния некристаллического вещества?

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

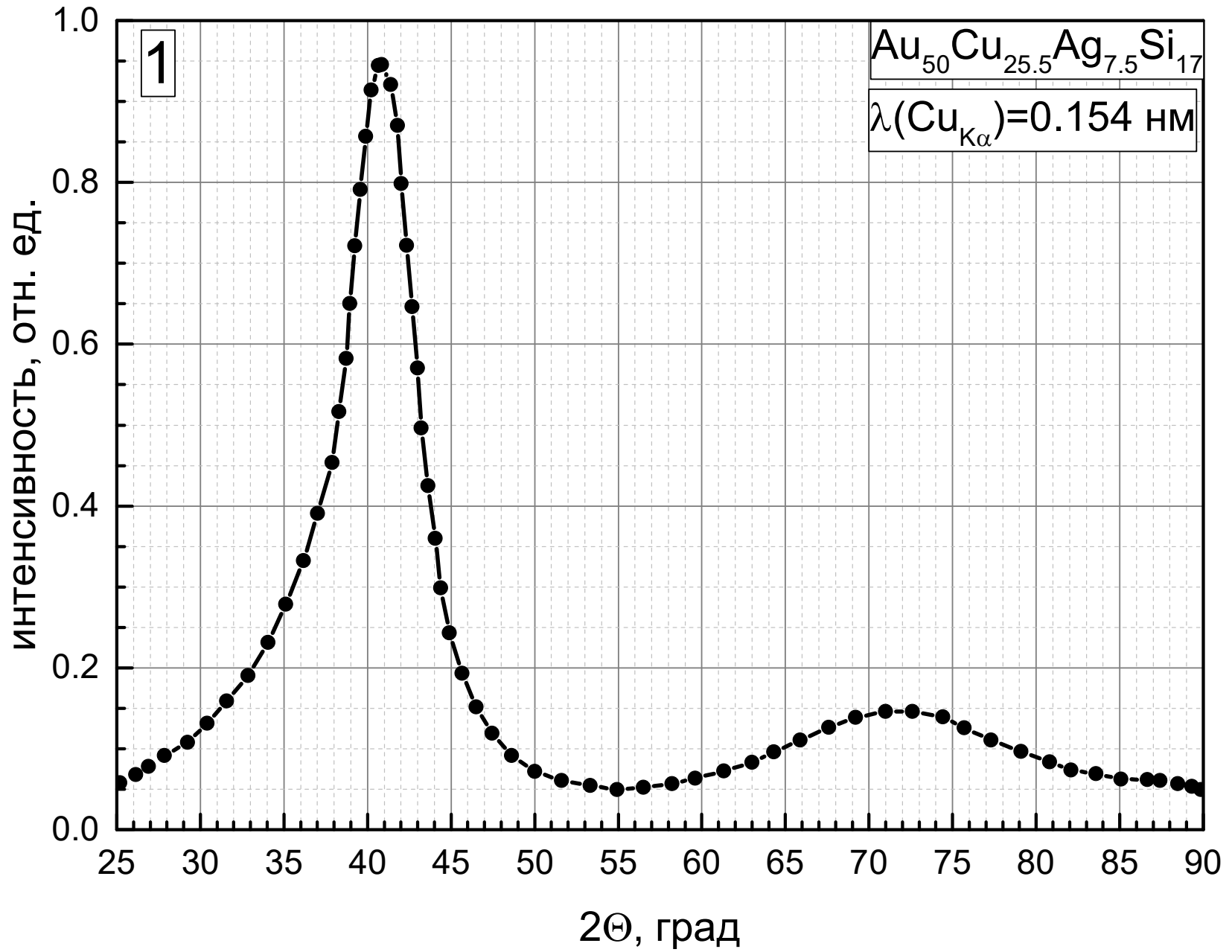
1. Созинов, С.А. Структурные методы исследования кристаллов: учебное пособие / С.А. Созинов, Л.В. Колесников. - Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. - 108 с. - ISBN 978-5-8353-1284-9; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232740>
2. Басалаев, Ю.М. Кристаллофизика и кристаллохимия: учебное пособие / Ю.М. Басалаев; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Кемеровский государственный университет». - Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2014. - 403 с.: ил. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-8353-1712-7; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=278304>
3. Газенаур, Е.Г. Методы исследования материалов: учебное пособие / Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина, В.И. Крашенинин. - Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2013. - 336 с. - ISBN 978-5-8353-1578-9; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232447>
4. Гольдаде, В.А. Физика конденсированного состояния: пособие / В.А. Гольдаде, Л.С. Пинчук; под ред. Н.К. Мышкина. - Минск: Белорусская наука, 2009. - 648 с; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=93309>
5. Физика твердого тела: учебное пособие / А.А. Корнилович, В.И. Ознобихин, И.И. Суханов, В.Н. Холявко. - Новосибирск: НГТУ, 2012. - 71 с. - ISBN 978-5-7782-2160-4; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=228969>
6. Современные методы структурного анализа веществ: учебник / М.Ф. Куприянов, А.Г. Рудская, Н.Б. Кофанова и др.; Федеральное агентство по образованию Российской Федерации, Федеральное государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Южный федеральный университет". - Ростов: Издательство Южного федерального университета, 2009. - 288 с. - Библиогр. в кн.. - ISBN 978-5-9275-0653-8; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=241003>
7. Фетисов, Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ: учебное пособие / Г.В. Фетисов; под ред. Л.А. Асланова. - Москва: Физматлит, 2007. - 673 с. - ISBN 978-5-9221-0805-8; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=76647>
8. Фомин, Д.В. Экспериментальные методы физики твердого тела: учебное пособие / Д.В. Фомин. - Москва; Берлин: Директ-Медиа, 2014. - 186 с.: ил.,

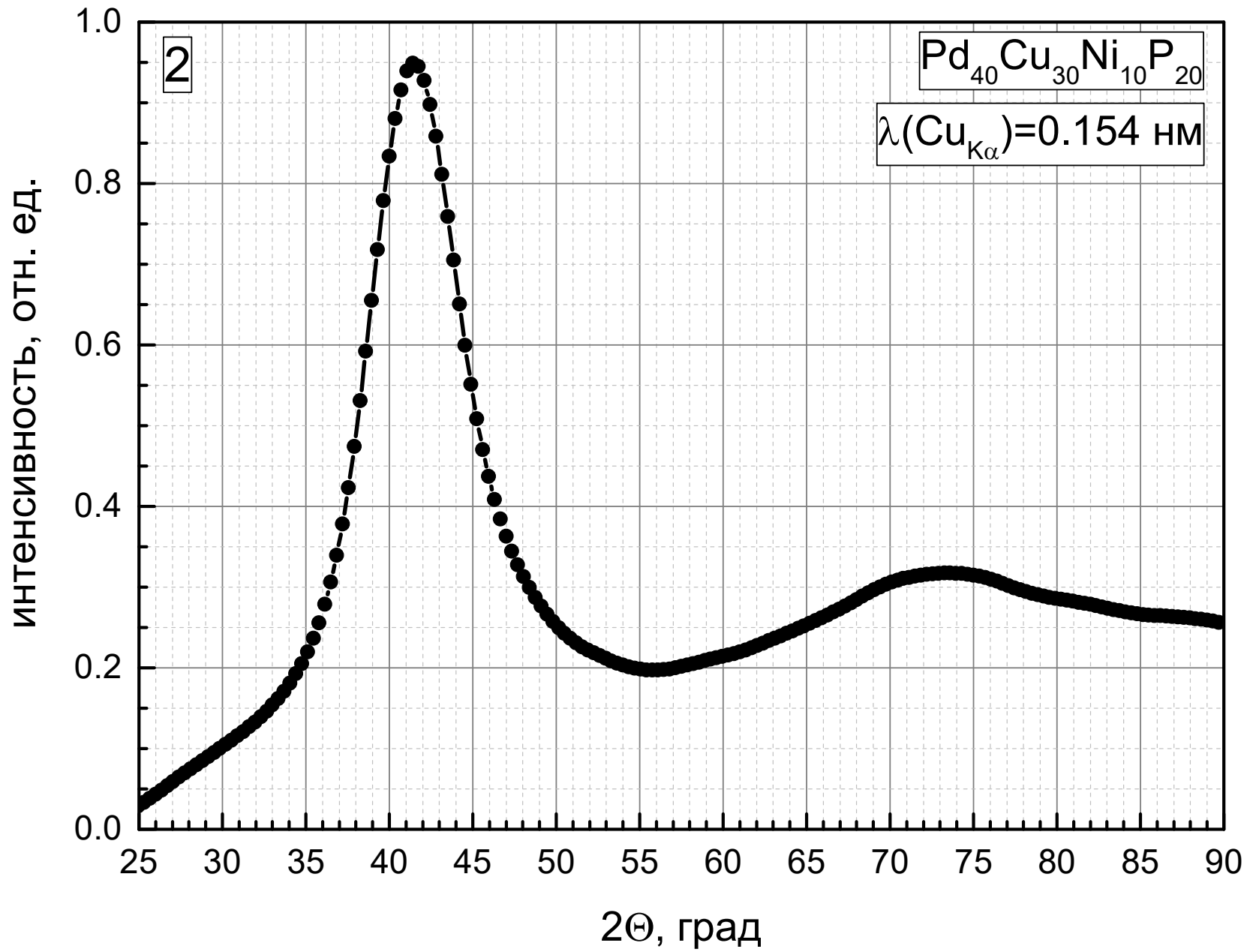
- схем., табл. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-4475-2829-4; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=259074>
9. Краснопевцев, Е.А. Квантовая механика в приложениях к физике твердого тела: учебное пособие / Е.А. Краснопевцев; Министерство образования и науки Российской Федерации, Новосибирский государственный технический университет. - Новосибирск: НГТУ, 2010. - 355 с.: граф., ил. - (Учебники НГТУ). - Библиогр.: с. 351-352. - ISBN 978-5-7782-1464-4; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=435995>
10. Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель; пер. с англ. А. Гусева. - Москва: Наука, 1978. - 788 с.: ил.; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=483361>
11. Петров А.Л. Структура и свойства неупорядоченных твердых тел: учеб. пособие / А.Л. Петров, А.А. Гаврилюк, С.М. Зубрицкий. – Иркутск: Изд-во Иркутского гос. ун-та, 2004. – 69 с.
12. Солодовников С.Ф. Основные термины и понятия структурной кристаллографии и кристаллохимии: словарь пособие / С.Ф. Солодовников. – Новосибирск: ИНХ СО РАН, 2005. – 115 с.
13. Гуртов В.А. Физика твердого тела для инженеров: учеб. пособие / В.А. Гуртов, Р.Н. Осауленко. – Издание 2-е, доп. – Москва: Техносфера, 2012. – 559 с.
14. Горшков В.С. Физическая химия силикатов и других тугоплавких соединений: учеб. для вузов / В.С. Горшков, В.Г. Савельев, Н.Ф. Федоров. – М.: Высш. шк. – 1988. – 400 с.
15. Рябов А.В. Новые металлические материалы и способы их производства: учеб. пособие / А.В. Рябов, К.Ю. Окишев. – Челябинск: Изд – во ЮУрГУ, 2007. – 64 с.
16. Афонин, Г.В. Релаксация упругих и вязкоупругих свойств, обусловленная структурной релаксацией объемных металлических стекол систем Zr-(Cu,Ag)-Al и Pd-Cu-Ni-P. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности «Физика конденсированного состояния»: 01.04.07 / Афонина Геннадия Витальевича. — Воронеж., 2012. – 99 с.
17. Абросимова Г.Е. Эволюция структуры аморфных сплавов: Обзоры актуальных проблем / Г.Е. Абросимова // Успехи физических наук – 2011 - Т. 181, №12 – С. 1268.
18. Модин Е.Б. Особенности структуры электролитически осажденных аморфных металлических сплавов CoP – CoNiP, CoW - CoNiW. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности «Физика конденсированного состояния»: 01.04.07 / Модина Евгения Борисовича. — Владивосток., 2015. – 133 с.
19. Жукова Л.А. Строение металлических жидкостей: учеб. пособие / Л.А. Жукова – Екатеринбург: УГТУ – УПИ, 2002. 46 с.

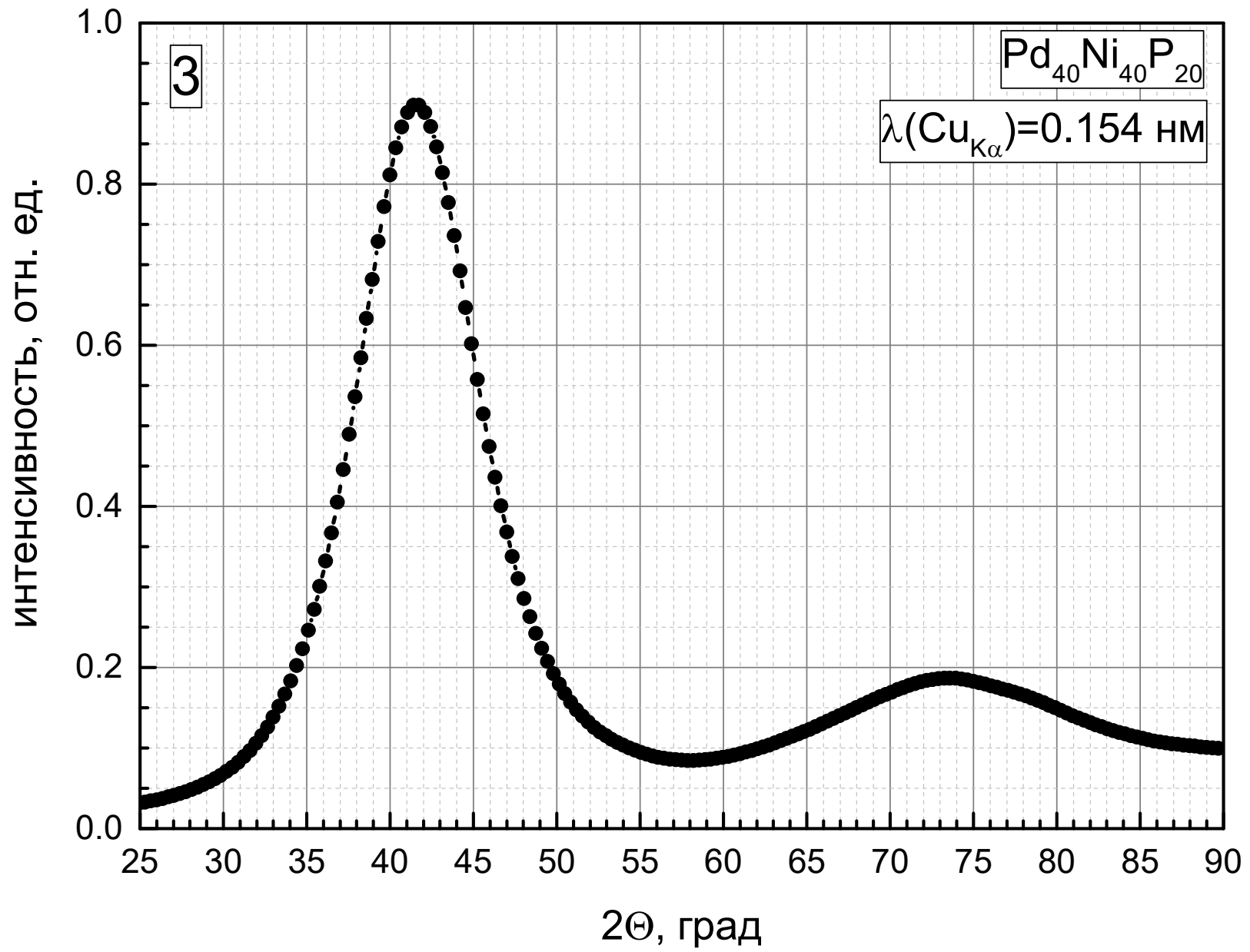
20. Ягодкин Ю.Д. Применение электронной микроскопии и рентгеноструктурного анализа для определения размеров структурных элементов в нанокристаллических материалах (Обзор) / Ю.Д. Ягодкин, С.В. Добаткин. // Заводская лаборатория. Диагностика материалов – 2007. - Т.73. – №1.- С. 38.
21. Хайрутдинова А.Ф. Локальные структурные свойства в модельных переохлажденных жидкостях. Вода. Магистерская диссертация по специальности «Физика сложных систем» / А.Ф. Хайрутдинова. – Казань., 2015. – 80 с.
22. Ванецев А.С. Эволюция микроструктуры индивидуальных оксидов металлов при микроволновом воздействии / А.С. Ванецев, В.А. Кецко, Ю.Д. Третьяков // Конденсированные среды и межфазные границы – 2009. – Т.11. - №4. – С. 280 – 289.
23. Вайнштейн Б.К. Современная кристаллография (в четырех томах). Том 1. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии / Б.К. Вайнштейн. – М.: Изд-во «Наука» Москва, 1979. – 384 с.
24. Кудрявцева Р.В. Расшифровка структуры ближнего порядка аморфного кремния / Сост. Р.В. Кудрявцева, Д.А. Павлов. – Н.Новгород: ННГУ, 1998. – 14 с.

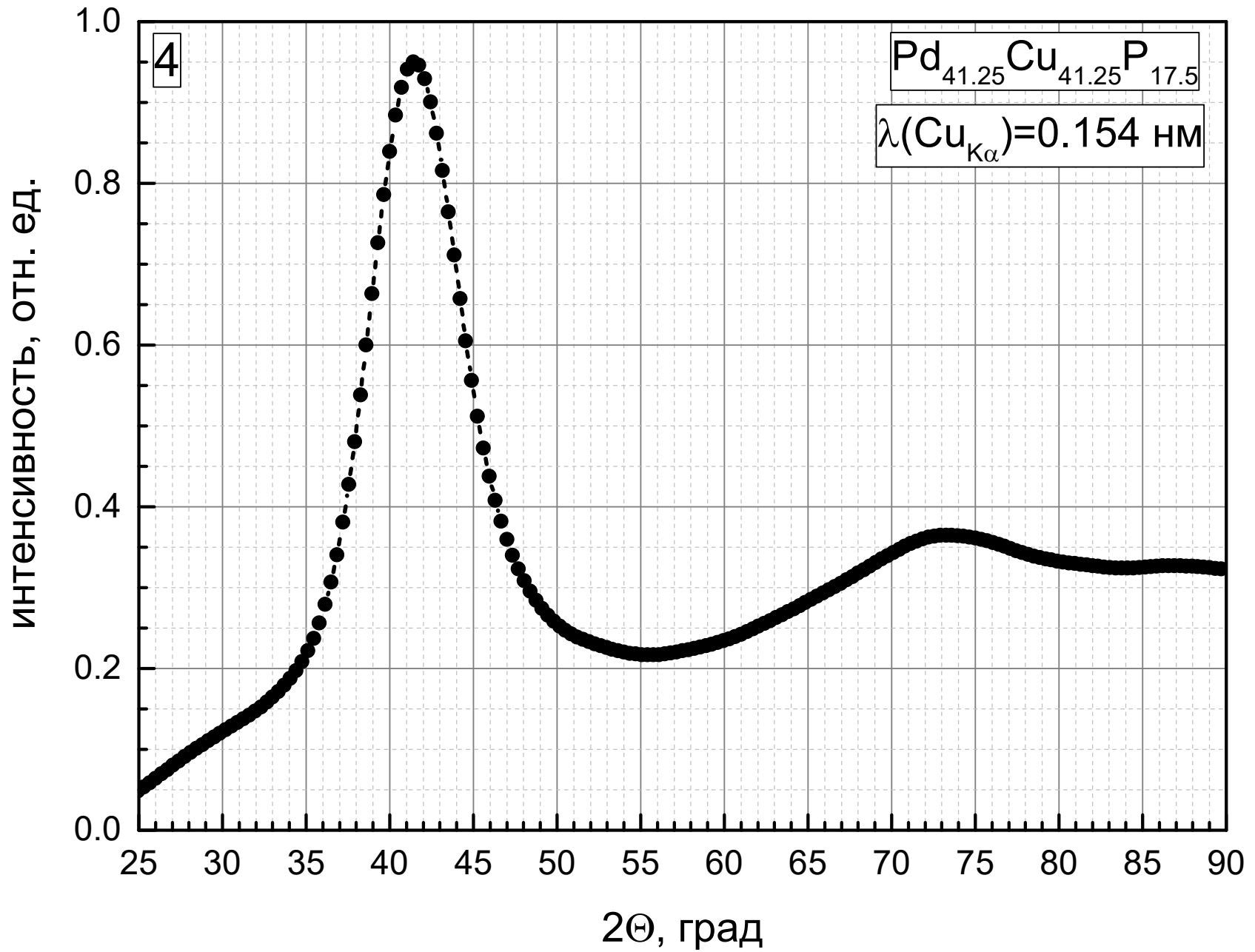
ДЛЯ ЗАМЕТОК

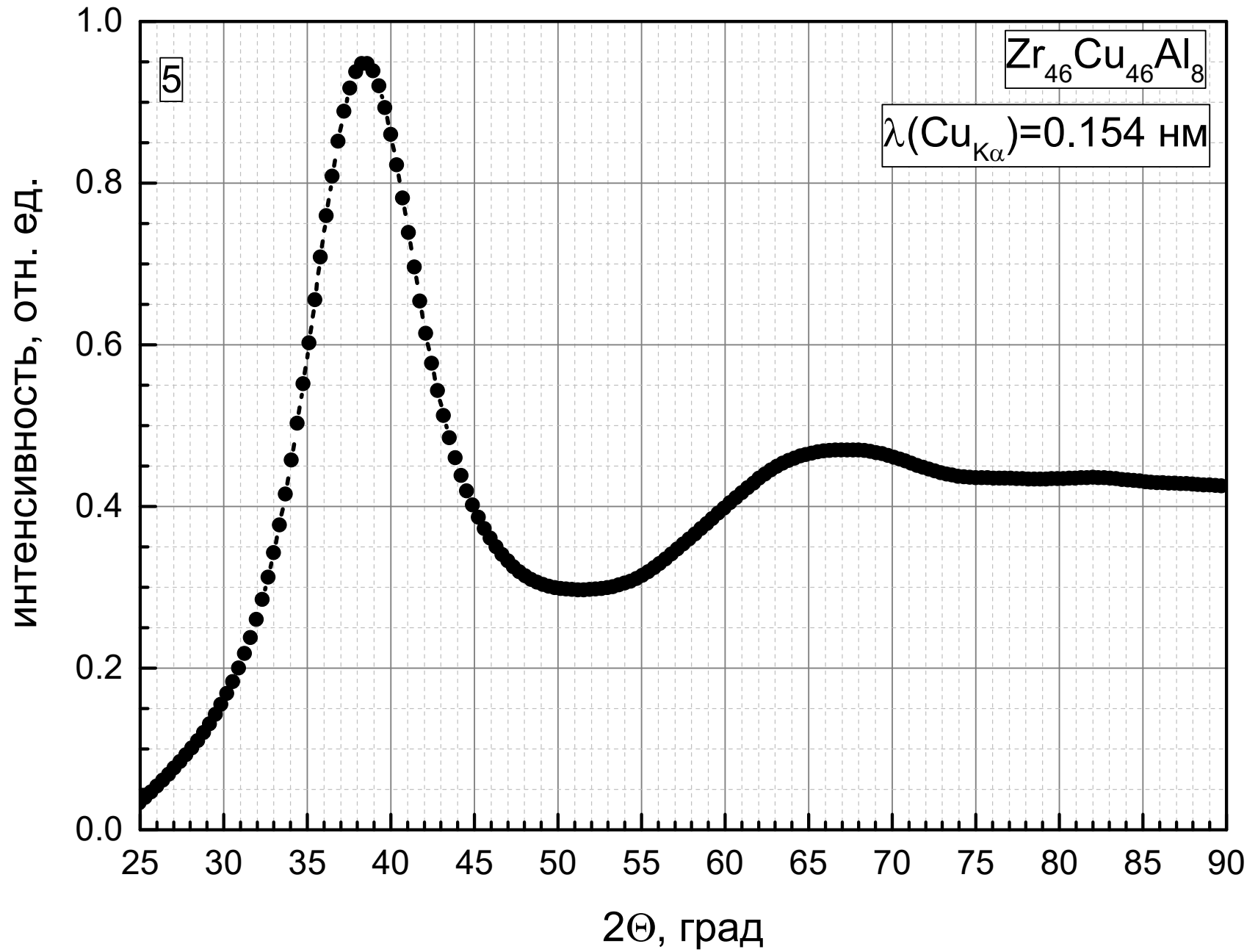
Приложение №1. Дифрактограммы металлических стекол

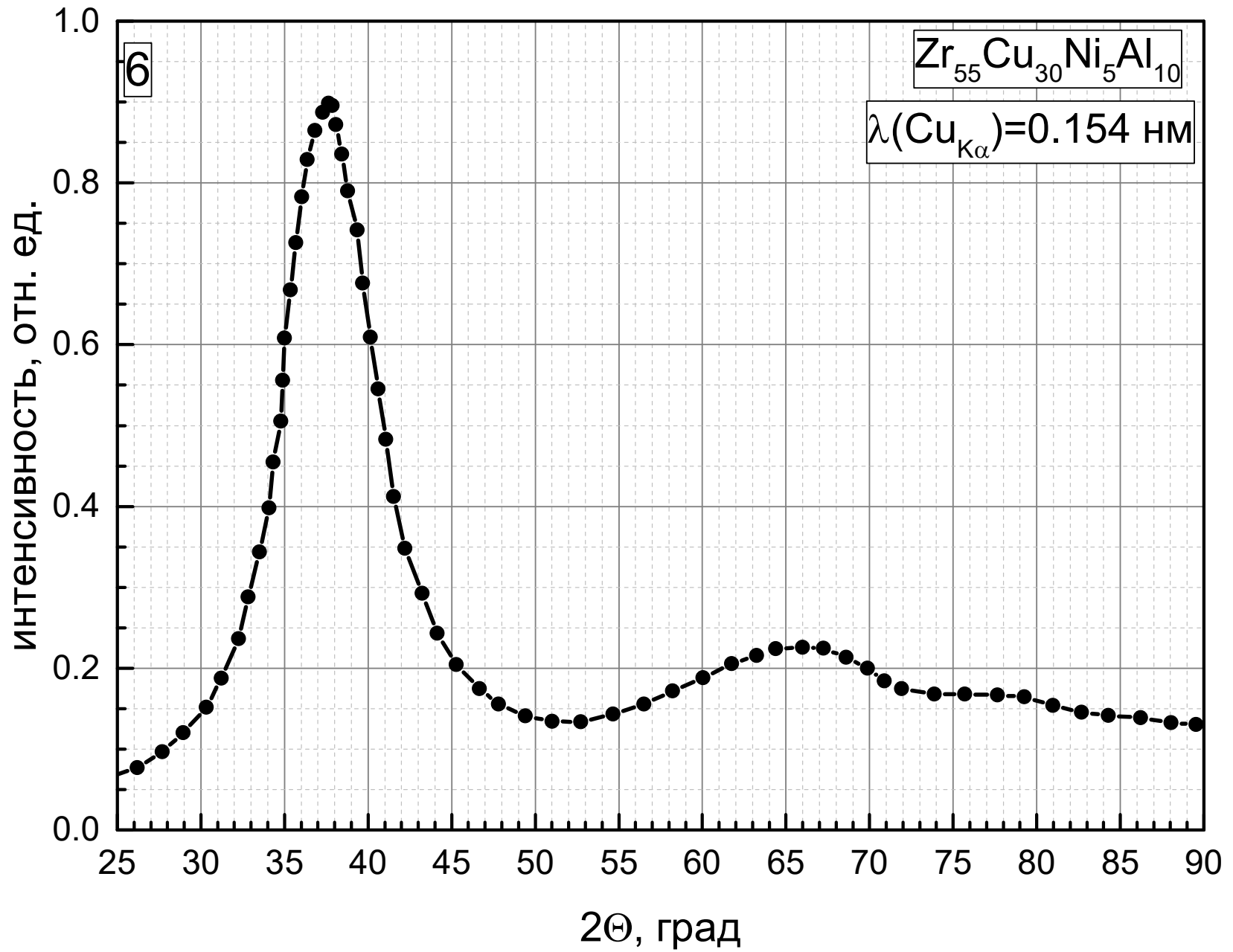


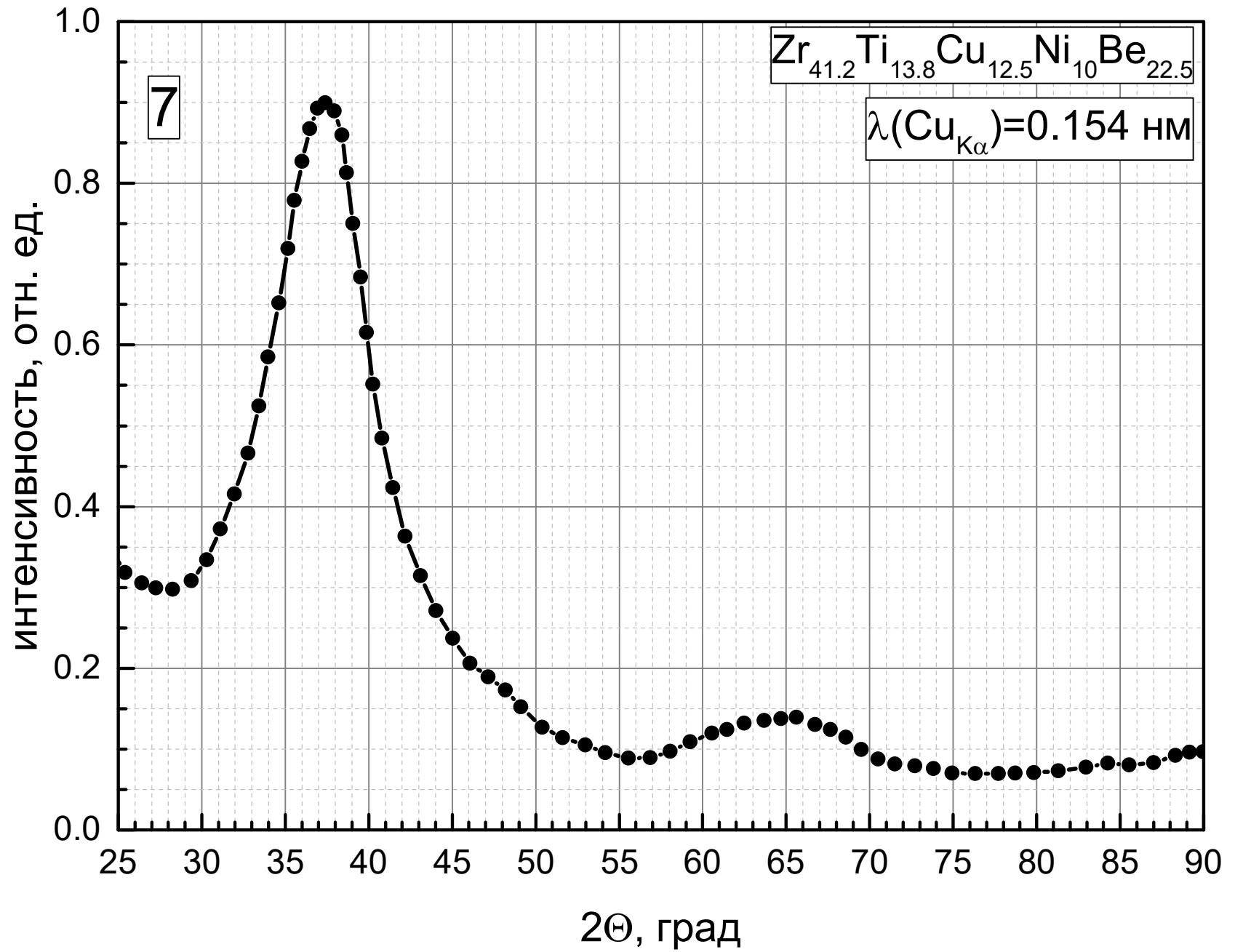


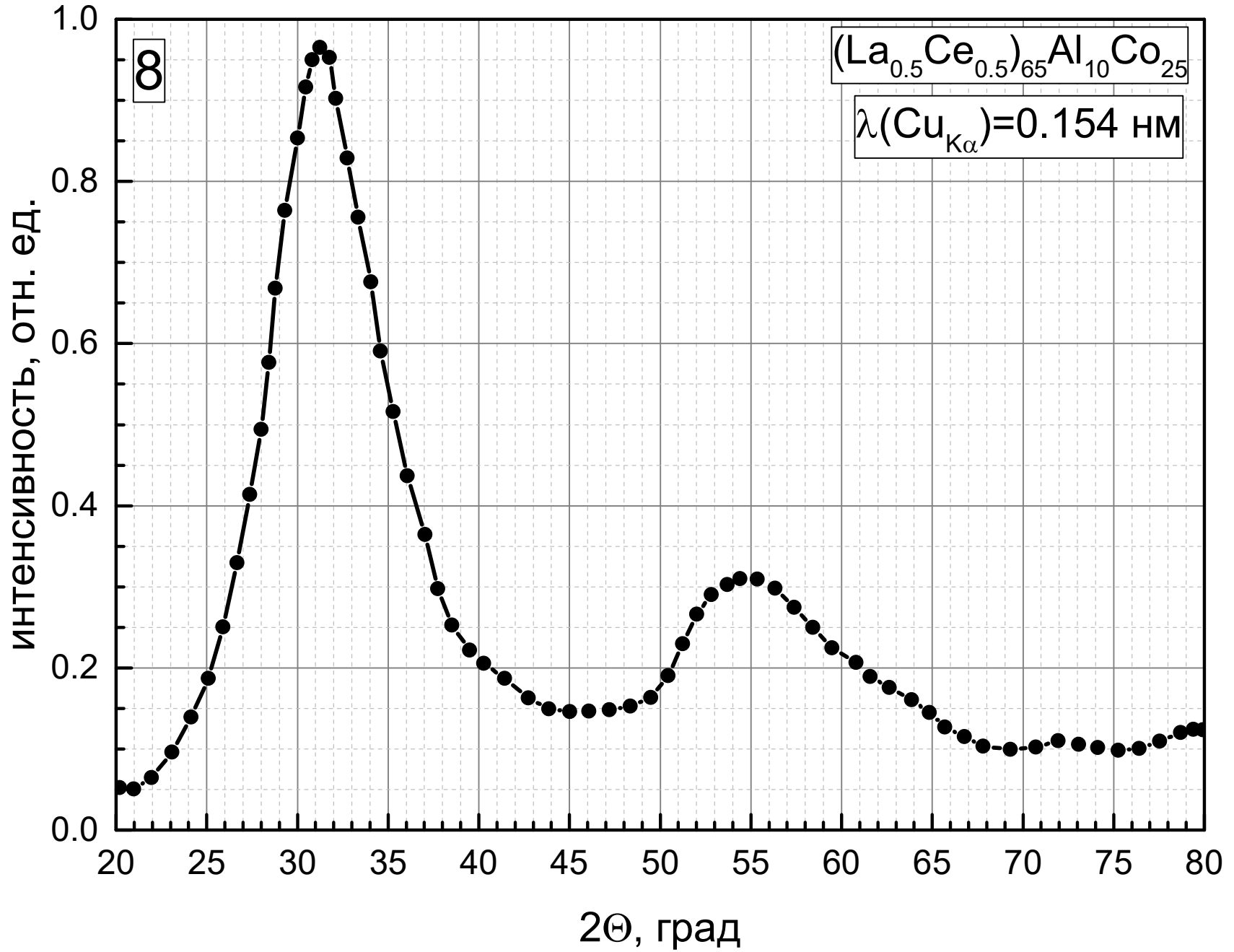


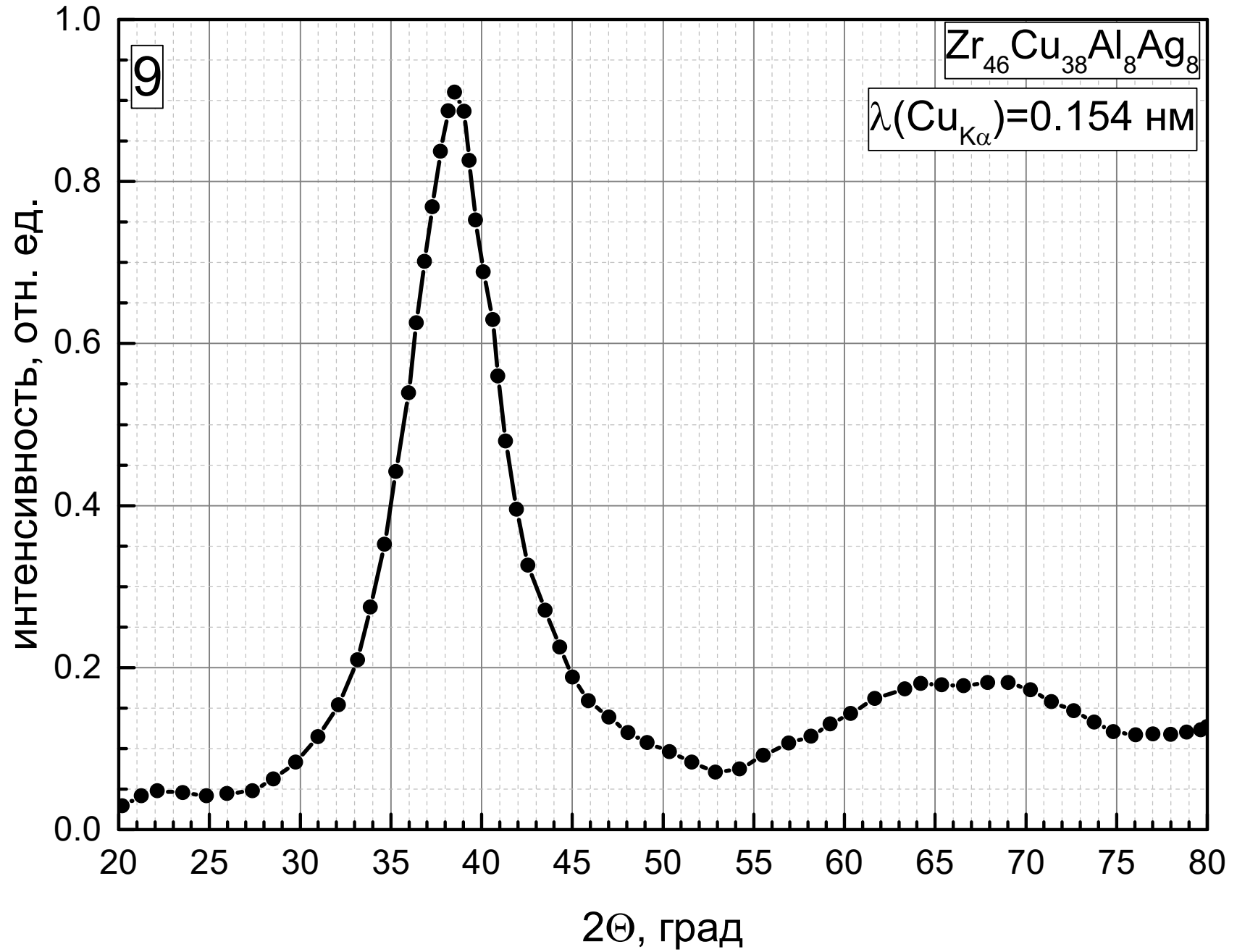


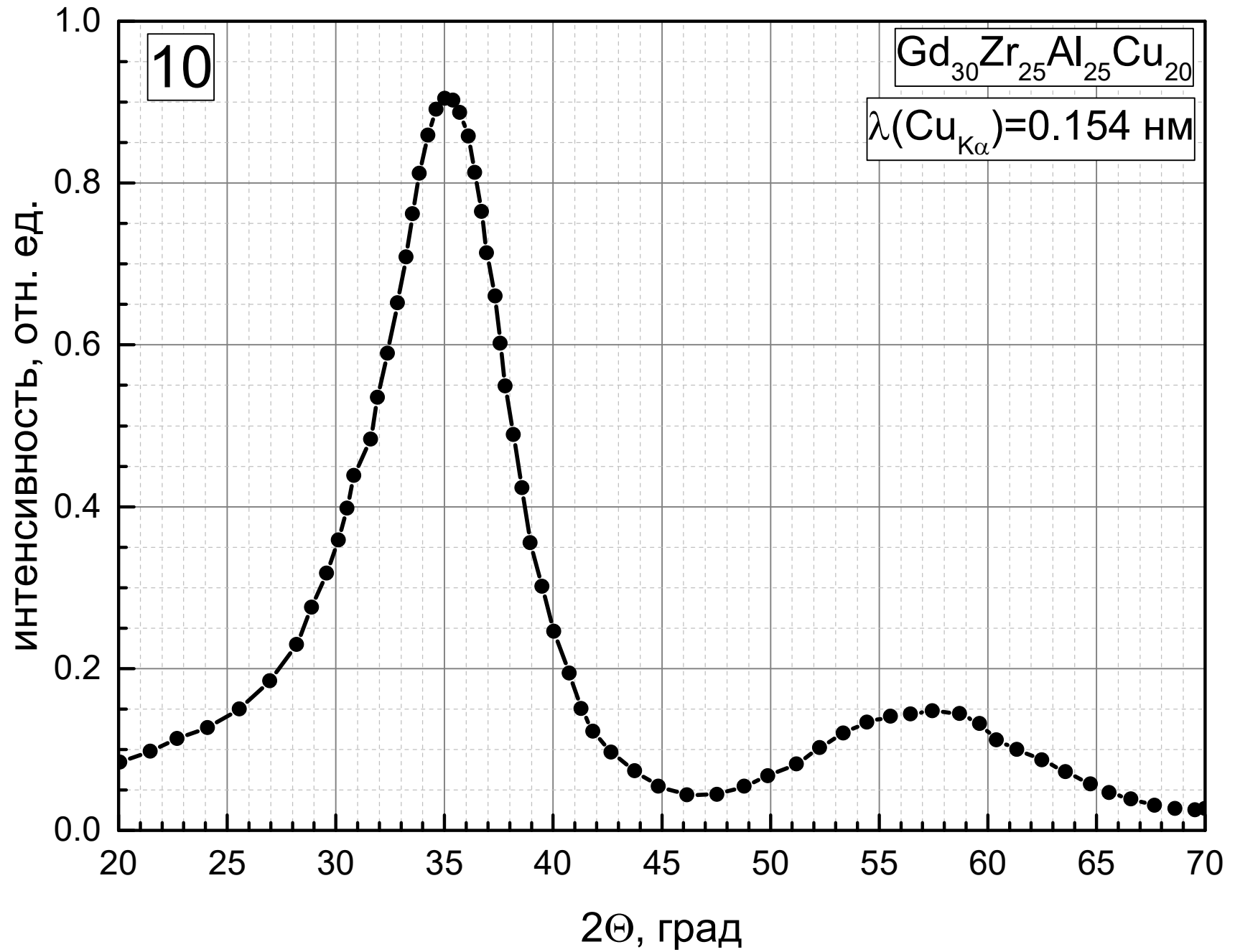


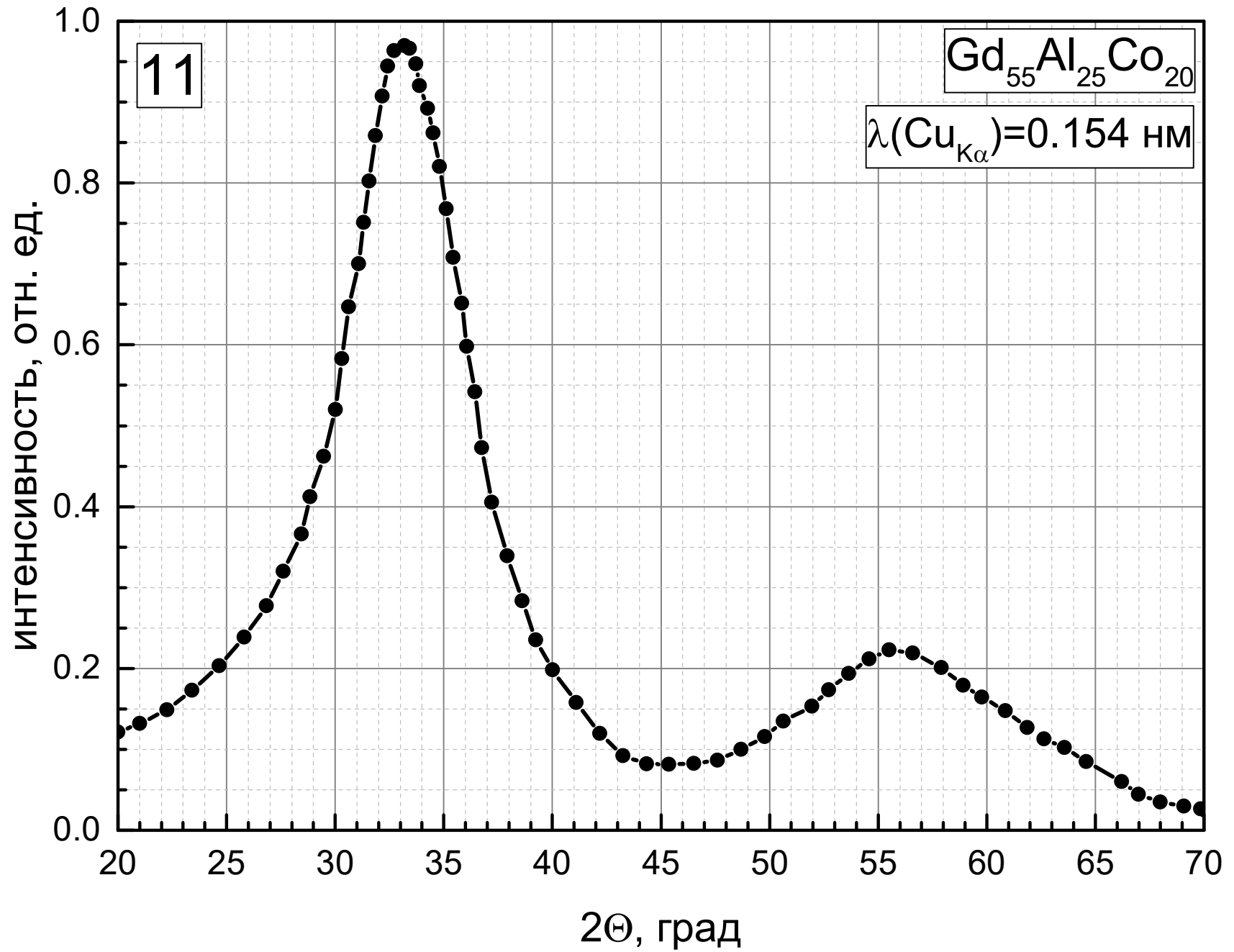


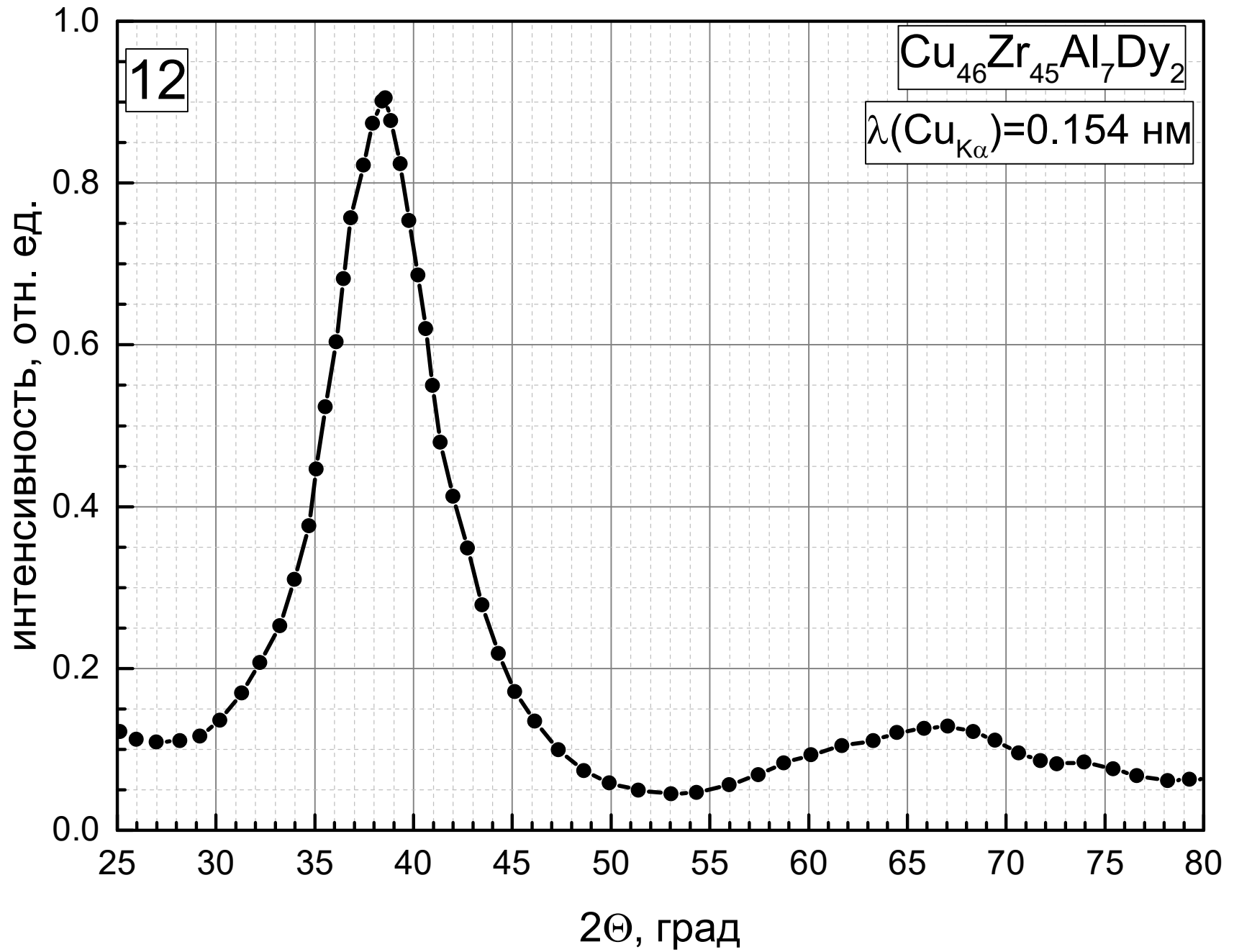


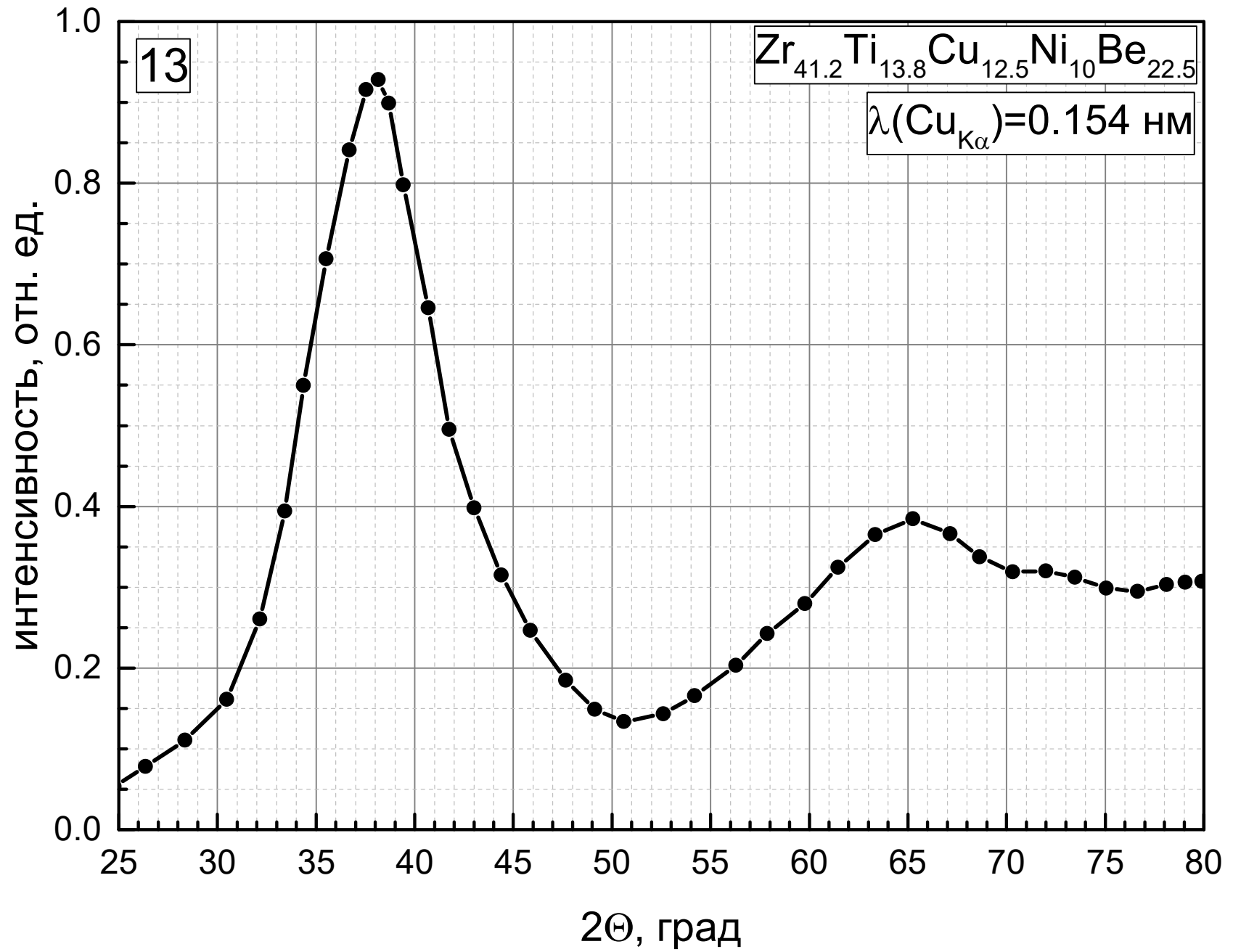


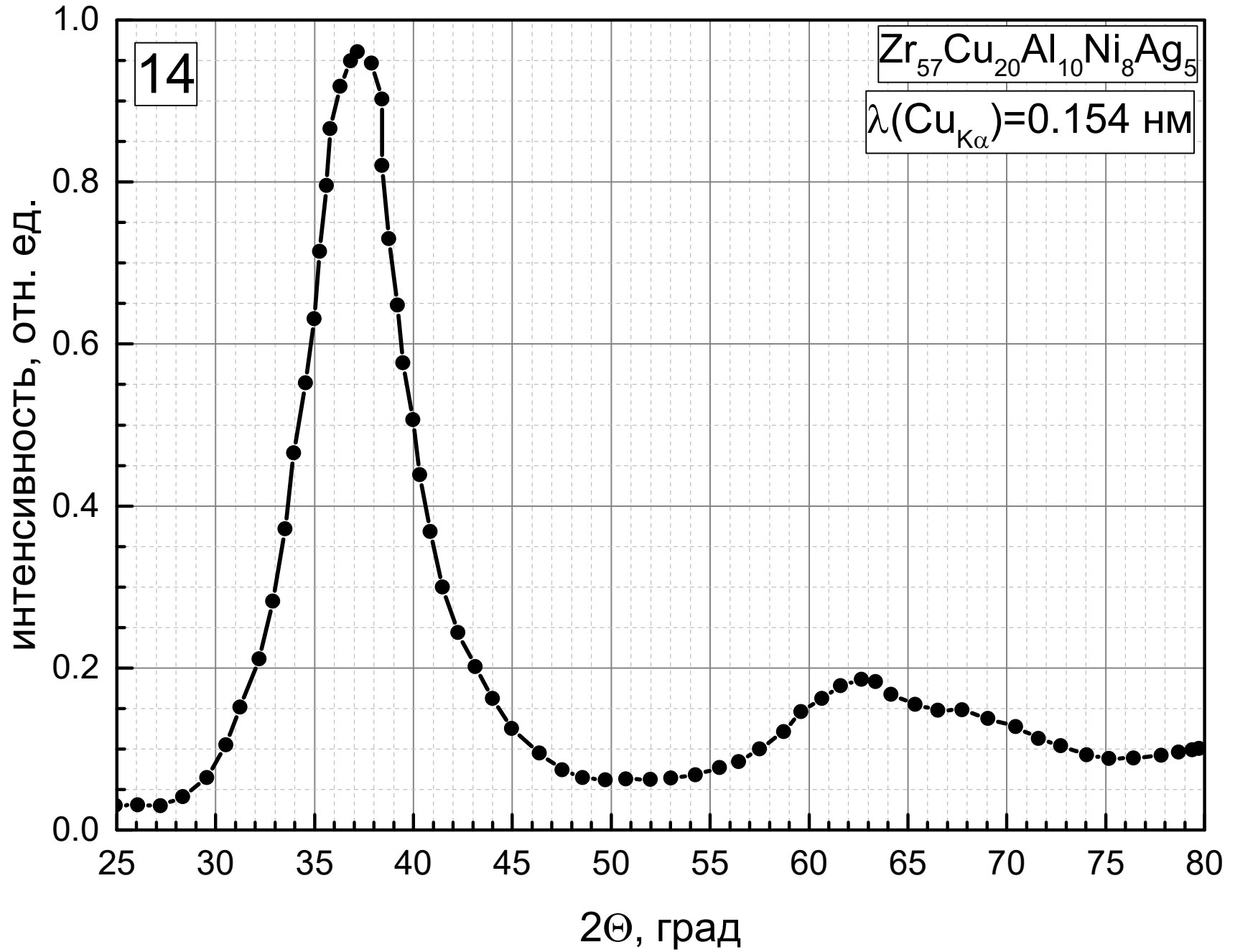


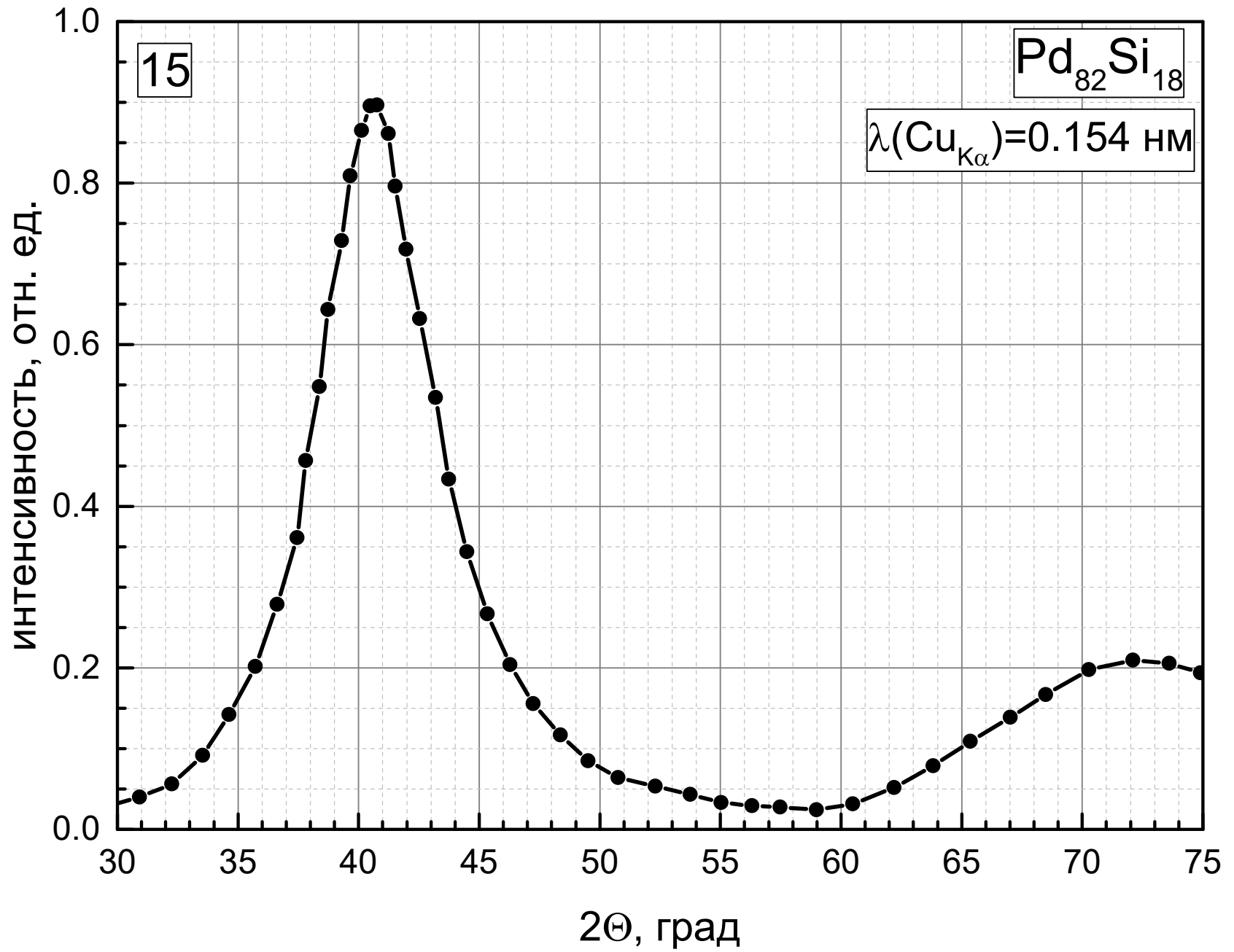


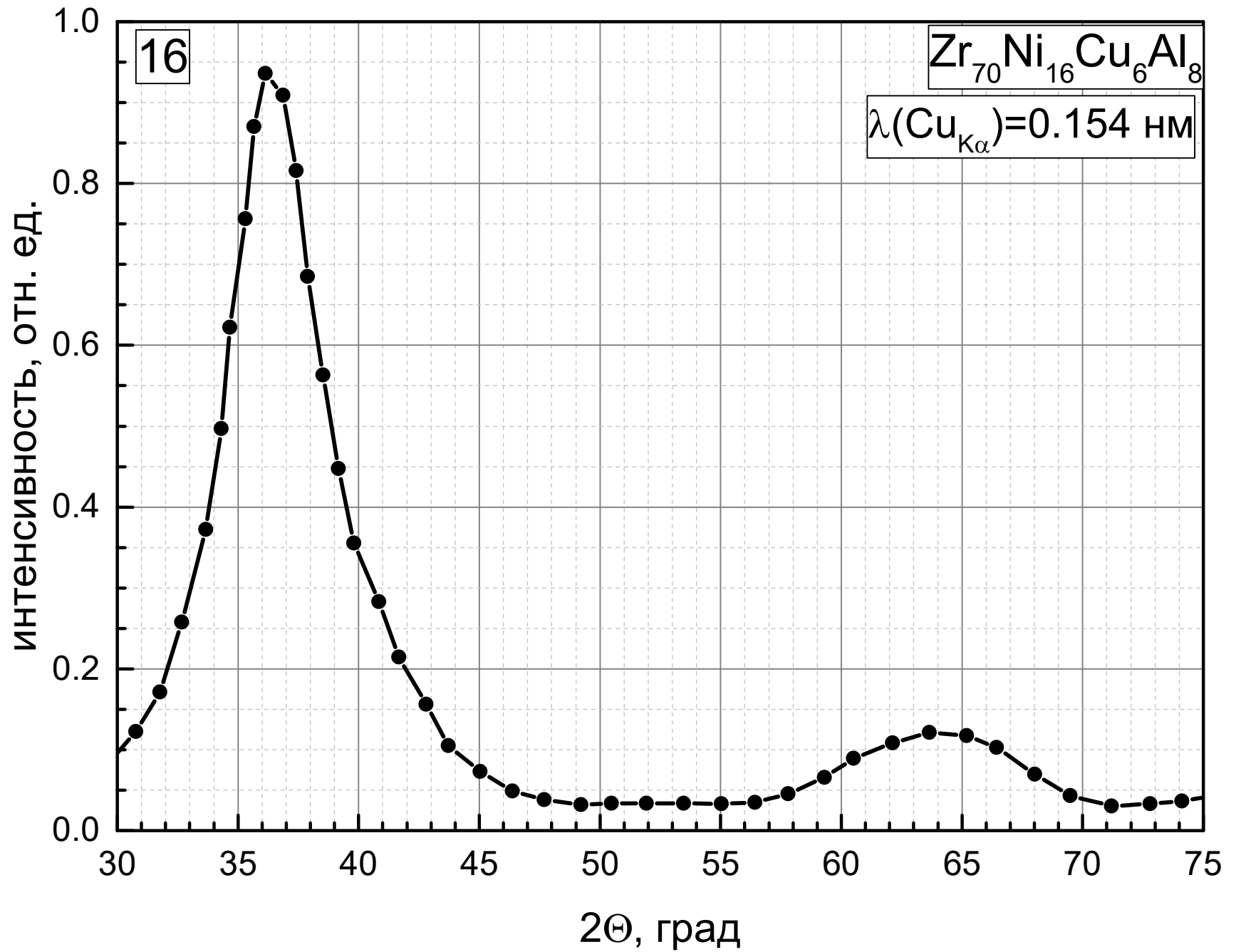


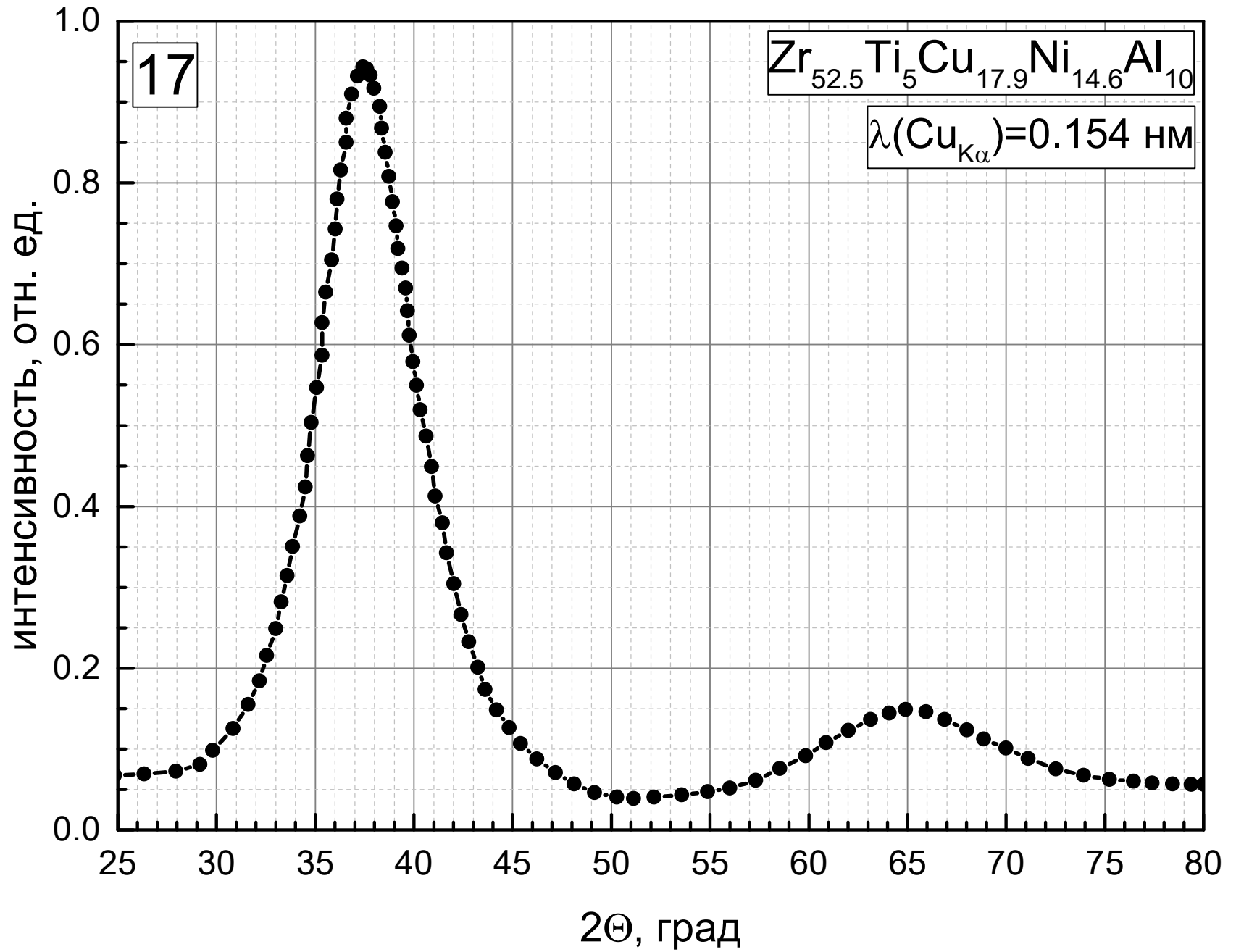


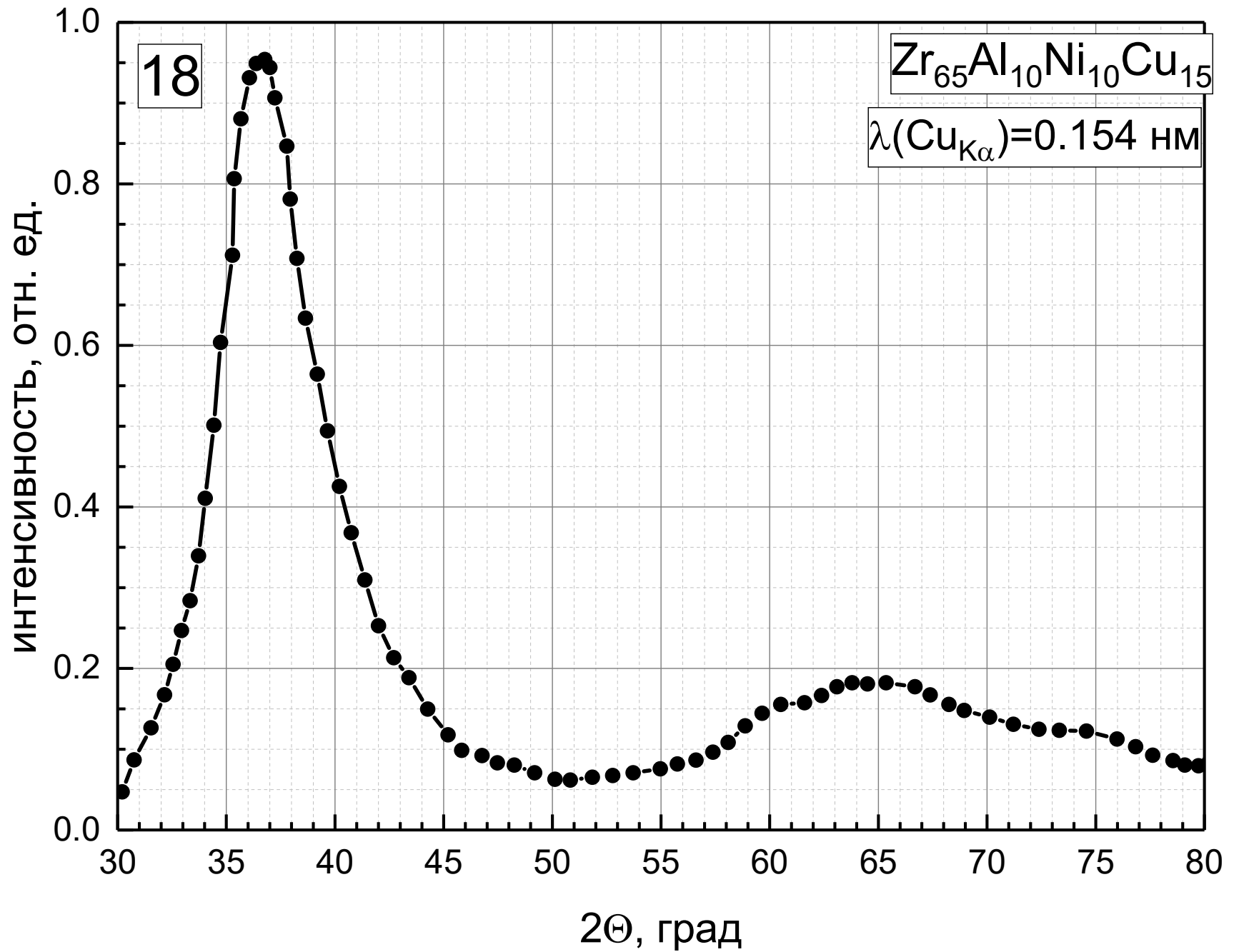


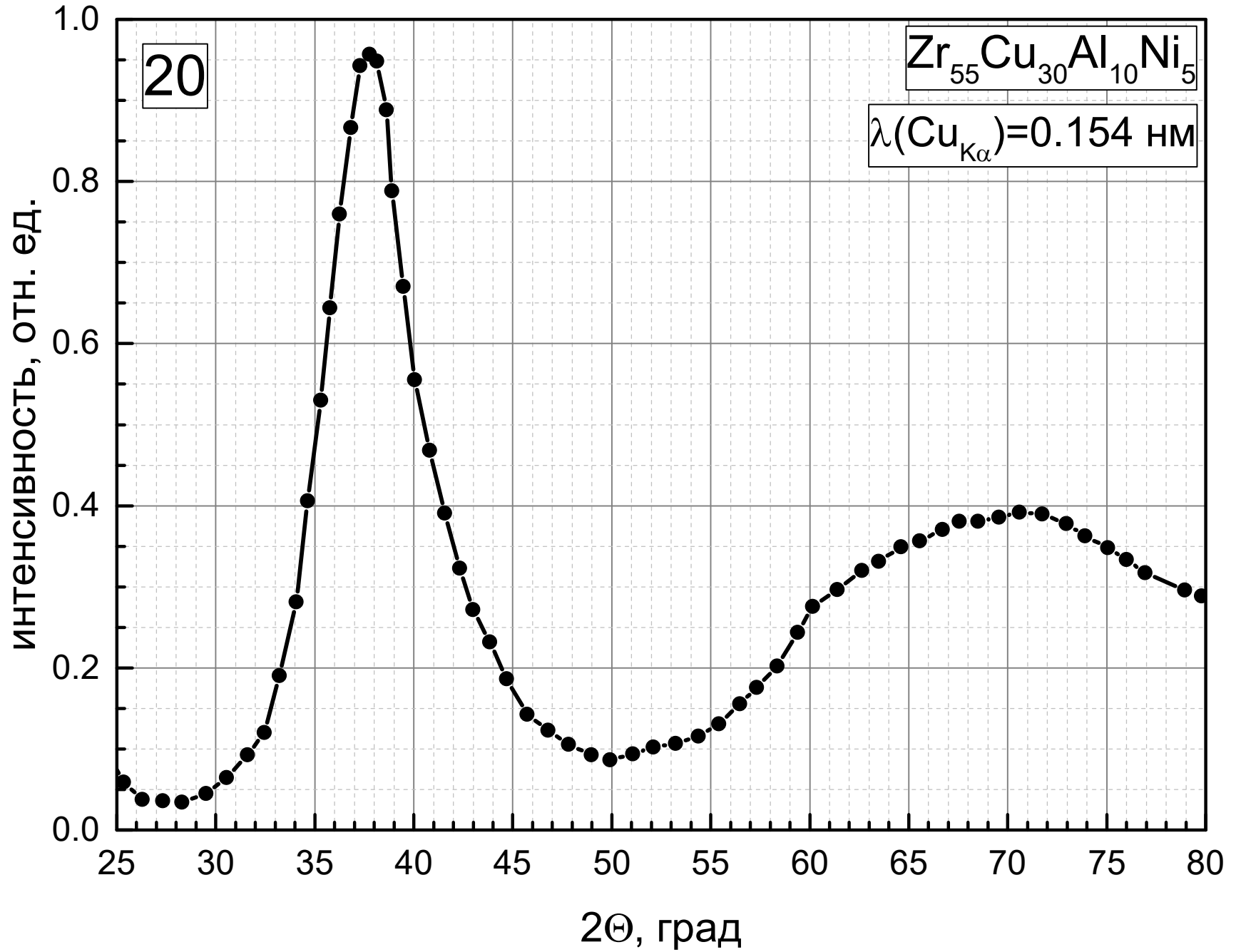


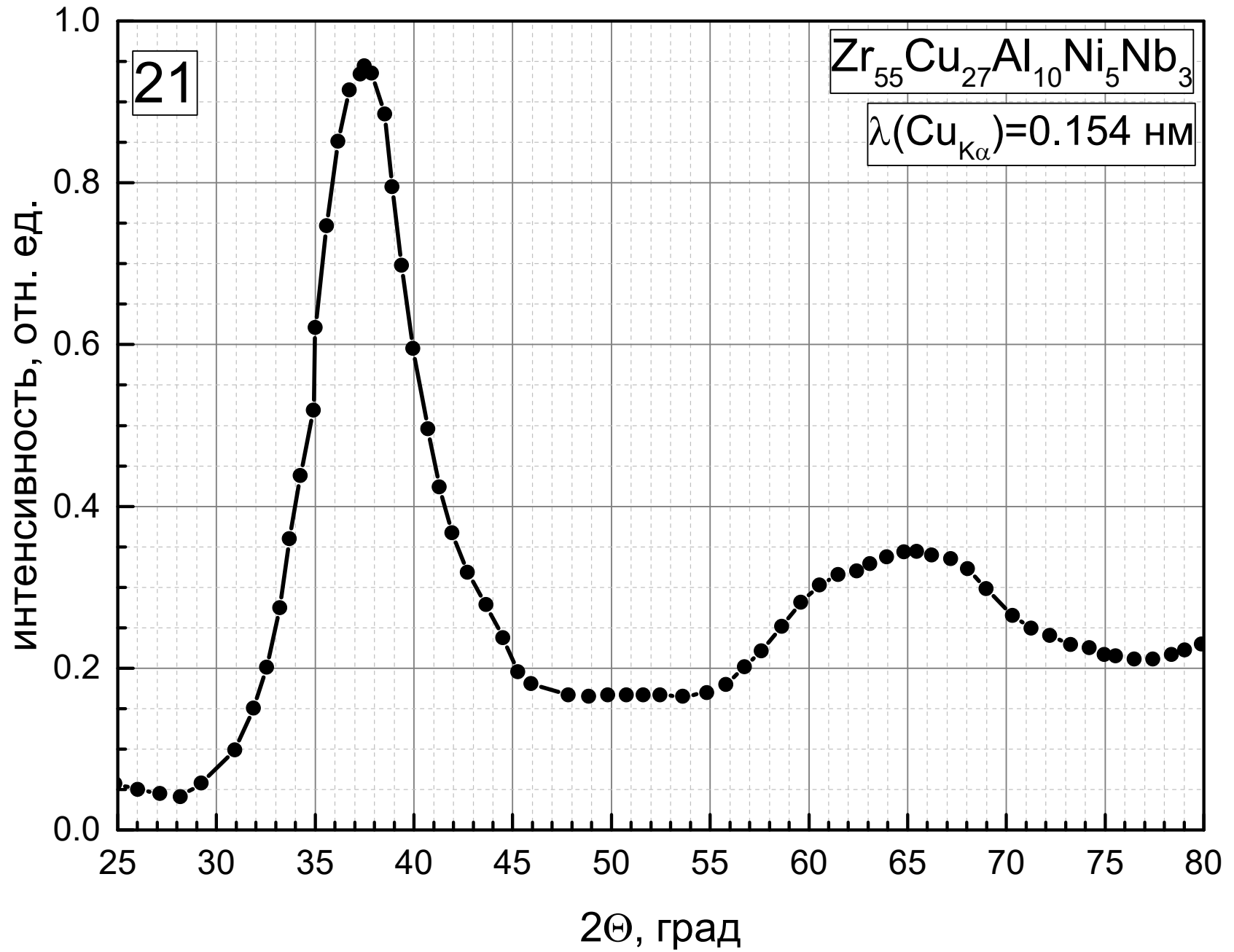




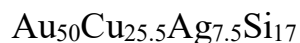






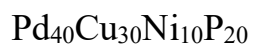


**Приложение №2. Экспериментальные данные
интенсивности рассеяния рентгеновских лучей**



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
25.19444	0.05781
26.15441	0.06802
26.90245	0.07824
27.86242	0.09125
29.24628	0.10794
30.41819	0.13113
31.59011	0.15893
32.868	0.19047
34.03991	0.23123
35.10586	0.27848
36.1718	0.33219
37.01957	0.39056
37.87357	0.45353
38.30369	0.51656
38.72757	0.58235
38.93952	0.65004
39.25743	0.72136
39.58158	0.79089
39.89949	0.85668
40.2174	0.91412
40.64752	0.94469
40.85946	0.94561
41.38932	0.92057
41.8132	0.8705
42.03138	0.79826
42.34929	0.72228
42.66721	0.6463
42.98512	0.57032
43.20329	0.49618
43.62718	0.42481
44.05106	0.35994
44.37521	0.29881
44.90507	0.2432
45.6531	0.19318
46.50087	0.15151

47.46084	0.1191
48.63275	0.0913
50.01661	0.07184
51.61865	0.06073
53.32042	0.05423
54.92245	0.04957
56.51825	0.05233
58.22002	0.05694
59.61011	0.06344
61.31188	0.07271
63.01366	0.0829
64.29778	0.09591
65.89358	0.11075
67.59535	0.12647
69.19738	0.1385
71.00512	0.14593
72.60716	0.14593
74.4149	0.13942
75.69279	0.12555
77.29482	0.11075
79.10256	0.09683
80.80433	0.08382
82.08845	0.07363
83.57828	0.06897
85.06811	0.06247
86.66391	0.06155
87.41194	0.06063
88.47789	0.05694
89.33189	0.05326
89.86175	0.04957



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
25.475	0.03577
26.475	0.05035
27.475	0.06569
28.475	0.08035
29.475	0.09459
30.475	0.10917
31.475	0.12476

32.475	0.14288
33.475	0.1654
34.475	0.19554
35.475	0.23851
36.475	0.30605
37.475	0.41511
38.475	0.57085
39.475	0.74756
40.475	0.89038
41.475	0.94465
42.475	0.89205
43.475	0.76207
44.475	0.61117
45.475	0.48486
46.475	0.39707
47.475	0.33878
48.475	0.29722
49.475	0.26587
50.475	0.24318
51.475	0.22727
52.475	0.21621
53.475	0.2073
54.475	0.20078
55.475	0.19741
56.475	0.19773
57.475	0.20145
58.475	0.20656
59.475	0.21164
60.475	0.21663
61.475	0.22299
62.475	0.23125
63.475	0.23975
64.475	0.24859
65.475	0.25751
66.475	0.26753
67.475	0.27831
68.475	0.28996
69.475	0.30055
70.475	0.30839
71.475	0.31331
72.475	0.31614

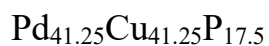
73.475	0.31716
74.475	0.31616
75.475	0.31258
76.475	0.30645
77.475	0.2989
78.475	0.29242
79.475	0.28764
80.475	0.28406
81.475	0.28042
82.475	0.27638
83.475	0.27175
84.475	0.26782
85.475	0.26538
86.475	0.2641
87.475	0.26276
88.475	0.26043
89.475	0.25724
90	0.25529



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
25.475	0.03336
26.475	0.03796
27.475	0.04384
28.475	0.05151
29.475	0.06153
30.475	0.07508
31.475	0.09429
32.475	0.12076
33.475	0.15729
34.475	0.20712
35.475	0.27493
36.475	0.3654
37.475	0.48086
38.475	0.61558
39.475	0.74951
40.475	0.8523
41.475	0.89525
42.475	0.86711
43.475	0.77838

44.475	0.65637
45.475	0.53023
46.475	0.41871
47.475	0.32854
48.475	0.25885
49.475	0.20666
50.475	0.1684
51.475	0.14105
52.475	0.12199
53.475	0.10873
54.475	0.09896
55.475	0.09169
56.475	0.08711
57.475	0.08474
58.475	0.08472
59.475	0.08669
60.475	0.09026
61.475	0.09554
62.475	0.1017
63.475	0.10911
64.475	0.11713
65.475	0.12578
66.475	0.13516
67.475	0.14499
68.475	0.15477
69.475	0.16392
70.475	0.17237
71.475	0.17962
72.475	0.18476
73.475	0.18652
74.475	0.18472
75.475	0.18028
76.475	0.17476
77.475	0.16885
78.475	0.16199
79.475	0.1537
80.475	0.14444
81.475	0.1356
82.475	0.12785
83.475	0.12109
84.475	0.11526

85.475	0.11022
86.475	0.10652
87.475	0.10377
88.475	0.10168
89.475	0.09963
90	0.09855



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
25.475	0.05593
26.475	0.07146
27.475	0.08666
28.475	0.10123
29.475	0.11464
30.475	0.12743
31.475	0.14055
32.475	0.15555
33.475	0.17439
34.475	0.20004
35.475	0.23964
36.475	0.30672
37.475	0.41921
38.475	0.57867
39.475	0.75509
40.475	0.89386
41.475	0.94579
42.475	0.89463
43.475	0.76753
44.475	0.61699
45.475	0.48769
46.475	0.39567
47.475	0.33462
48.475	0.29346
49.475	0.26535
50.475	0.24751
51.475	0.23652
52.475	0.22891
53.475	0.22267
54.475	0.21847
55.475	0.21684

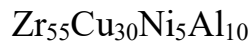
56.475	0.2181
57.475	0.22167
58.475	0.22617
59.475	0.23124
60.475	0.23794
61.475	0.24672
62.475	0.25635
63.475	0.26656
64.475	0.27733
65.475	0.28851
66.475	0.29975
67.475	0.31144
68.475	0.32368
69.475	0.33603
70.475	0.34762
71.475	0.35716
72.475	0.36311
73.475	0.36452
74.475	0.36285
75.475	0.35887
76.475	0.35287
77.475	0.34551
78.475	0.33905
79.475	0.33438
80.475	0.33084
81.475	0.32828
82.475	0.32593
83.475	0.32439
84.475	0.32439
85.475	0.3258
86.475	0.32705
87.475	0.32673
88.475	0.32553
89.475	0.3235
90	0.32214



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
25.475	0.04341
26.475	0.06379

27.475	0.08611
28.475	0.11127
29.475	0.14203
30.475	0.18051
31.475	0.23113
32.475	0.29906
33.475	0.39164
34.475	0.514
35.475	0.65918
36.475	0.80328
37.475	0.90921
38.475	0.94579
39.475	0.90513
40.475	0.80732
41.475	0.68731
42.475	0.57577
43.475	0.48777
44.475	0.42361
45.475	0.37797
46.475	0.34557
47.475	0.32325
48.475	0.30923
49.475	0.30128
50.475	0.29788
51.475	0.29681
52.475	0.29803
53.475	0.30179
54.475	0.30887
55.475	0.32048
56.475	0.3354
57.475	0.35295
58.475	0.37104
59.475	0.38924
60.475	0.40748
61.475	0.42503
62.475	0.44096
63.475	0.45339
64.475	0.4619
65.475	0.46687
66.475	0.46927
67.475	0.46978

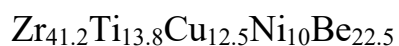
68.475	0.46845
69.475	0.46445
70.475	0.45821
71.475	0.45097
72.475	0.44412
73.475	0.43908
74.475	0.43623
75.475	0.4352
76.475	0.43489
77.475	0.43433
78.475	0.43387
79.475	0.43408
80.475	0.43459
81.475	0.43548
82.475	0.43537
83.475	0.43392
84.475	0.43188
85.475	0.42998
86.475	0.42887
87.475	0.42801
88.475	0.42687
89.475	0.42551
90	0.42479



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
24.36751	0.06436
26.20053	0.07681
27.68567	0.09638
28.94337	0.12005
30.31479	0.1515
31.2313	0.18778
32.26153	0.2364
32.83017	0.28805
33.51923	0.34346
34.08786	0.39813
34.31532	0.45494
34.77692	0.5055
34.89065	0.55578
35.00437	0.6082

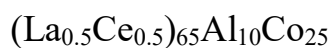
35.34556	0.66741
35.68674	0.72578
36.03461	0.78274
36.37579	0.82889
36.8307	0.86462
37.2923	0.88697
37.63349	0.89844
37.86094	0.89553
38.0884	0.87205
38.42958	0.83529
38.77745	0.79025
39.34609	0.74177
39.68727	0.67582
40.14887	0.60944
40.60378	0.54536
41.06538	0.48269
41.52029	0.41237
42.20266	0.34794
43.23289	0.29278
44.1494	0.24314
45.29337	0.20439
46.66479	0.17486
47.80875	0.15554
49.40763	0.14085
51.0065	0.13421
52.7258	0.13387
54.66585	0.1429
56.49887	0.15568
58.21148	0.17162
60.03781	0.18837
61.7571	0.20565
63.24225	0.21587
64.38621	0.22395
65.98509	0.22573
67.24278	0.22462
68.6142	0.21351
69.87189	0.20013
70.90213	0.1841
71.93237	0.17488
73.87242	0.16816
75.70544	0.16796

77.6455	0.16649
79.25107	0.16435
80.96367	0.15399
82.67627	0.14566
84.28184	0.14163
86.22189	0.13885
88.05491	0.13266
89.54006	0.13021
91.94172	0.13215



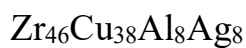
2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
25.39884	0.31828
26.41367	0.30572
27.24496	0.2991
28.25979	0.29777
29.36638	0.30836
30.28944	0.33435
31.12074	0.37228
31.94663	0.41537
32.77793	0.46616
33.42569	0.52435
33.97629	0.58506
34.62405	0.65199
35.18004	0.71906
35.54711	0.77903
36.00594	0.8273
36.47017	0.86731
36.929	0.89303
37.39323	0.89951
37.94383	0.88945
38.40806	0.8598
38.68336	0.81312
39.05042	0.75004
39.51465	0.68375
39.88172	0.61534
40.25418	0.55157
40.80478	0.48467
41.45254	0.42322
42.18667	0.36355

43.10973	0.31424
44.03279	0.27142
45.04762	0.23717
46.06244	0.2059
47.16904	0.18904
48.18386	0.17313
49.10692	0.15217
50.39705	0.12686
51.60081	0.11387
52.9827	0.10519
54.18106	0.09561
55.56295	0.08863
56.85847	0.08937
58.05683	0.09694
59.25519	0.10874
60.54532	0.11938
61.46838	0.12382
62.4832	0.13201
63.68156	0.13545
64.69639	0.13758
65.61945	0.1393
66.72604	0.13033
67.64911	0.12411
68.57217	0.11481
69.49523	0.09946
70.51005	0.08776
71.52488	0.08114
72.72324	0.07939
73.82983	0.07555
74.93643	0.07036
76.32372	0.06952
77.70561	0.06978
78.72043	0.06992
79.82703	0.07085
81.30608	0.07284
82.96327	0.07735
84.2588	0.08236
85.54892	0.08043
87.02258	0.08322
88.31271	0.09206
89.144	0.09587
89.9753	0.09677



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
20.1956	0.0523
20.98585	0.05062
21.94544	0.0648
23.08977	0.09619
24.14172	0.13906
25.10644	0.18719
25.89669	0.25041
26.68181	0.32955
27.38483	0.41381
28.00061	0.49426
28.43678	0.57669
28.79086	0.6683
29.31427	0.76402
30.01728	0.85321
30.45346	0.91619
30.80753	0.95001
31.24371	0.96507
31.77225	0.95282
32.1212	0.90233
32.73698	0.82852
33.34762	0.75549
34.05064	0.67587
34.57405	0.59089
35.27707	0.51584
36.06732	0.43697
37.03204	0.36438
37.73505	0.29783
38.5253	0.25255
39.49002	0.22169
40.27514	0.20562
41.41946	0.18719
42.73313	0.16277
43.87232	0.14911
45.01151	0.14574
46.06347	0.14641
47.20266	0.14843
48.34698	0.15293
49.48617	0.16345

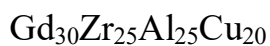
50.45089	0.19057
51.24114	0.22984
52.02626	0.26633
52.81651	0.29011
53.694	0.30262
54.39701	0.31
55.36174	0.3091
56.32646	0.29813
57.37841	0.27438
58.43037	0.24989
59.48233	0.22479
60.79599	0.20668
61.58624	0.18922
62.63819	0.17551
63.86975	0.16075
64.83447	0.14506
65.70683	0.12686
66.76392	0.115
67.81587	0.10356
69.30401	0.09923
70.71004	0.10222
71.93646	0.10987
73.07565	0.10563
74.12761	0.10158
75.2668	0.09801
76.40599	0.10023
77.55032	0.10967
78.68951	0.12016
79.39252	0.12423
79.91594	0.12368



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
20.1956	0.02913
21.24756	0.04172
22.12504	0.04791
23.52594	0.04556
24.83961	0.04172
25.98393	0.04428
27.38483	0.04787

28.52402	0.06254
29.75558	0.08299
30.982	0.11467
32.1212	0.15387
33.17315	0.20962
33.87617	0.27459
34.66642	0.35229
35.27707	0.44188
35.98008	0.53901
36.41626	0.6254
36.85757	0.70136
37.29374	0.76886
37.73505	0.83724
38.17123	0.88706
38.5253	0.91038
39.04871	0.8863
39.31042	0.8262
39.66449	0.75249
40.10067	0.68866
40.62921	0.62925
40.89092	0.55961
41.3271	0.47956
41.94288	0.39503
42.55866	0.32625
43.52338	0.27089
44.3085	0.22538
45.01151	0.18789
45.889	0.15878
47.02819	0.13896
48.08014	0.11982
49.1321	0.10705
50.36366	0.09574
51.59009	0.08314
52.90375	0.07098
54.22254	0.0746
55.53621	0.09125
56.9371	0.10641
58.16866	0.11491
59.22062	0.13021
60.35981	0.14323
61.67347	0.16174

63.34121	0.17323
64.21869	0.18027
65.35789	0.17835
66.58431	0.17771
67.90311	0.18155
69.0423	0.18134
70.26873	0.17216
71.40792	0.1579
72.63948	0.14643
73.77867	0.13256
74.83063	0.12067
76.05705	0.11687
77.02177	0.11815
77.98649	0.11751
78.86398	0.12007
79.65423	0.12284
80.00317	0.12668



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
20.06197	0.08417
21.45743	0.09784
22.69432	0.11326
24.08978	0.12675
25.56227	0.14997
26.9532	0.18461
28.19462	0.22945
28.89235	0.27544
29.58556	0.31776
30.12924	0.35877
30.51436	0.39823
30.82698	0.43876
31.60173	0.48355
31.90982	0.53498
32.37648	0.58963
32.83862	0.65184
33.22826	0.70852
33.53635	0.76209
33.84444	0.81175
34.23408	0.85919

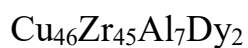
34.61919	0.89122
35.00884	0.90448
35.39395	0.9021
35.70657	0.88742
36.09168	0.85777
36.39977	0.81317
36.71239	0.76482
36.94346	0.71375
37.32857	0.66014
37.56417	0.60182
37.79523	0.54909
38.18035	0.48888
38.56999	0.42355
38.9551	0.35536
39.49879	0.30148
40.04247	0.24615
40.73568	0.19442
41.27936	0.15068
41.82305	0.12251
42.67483	0.09641
43.75767	0.07342
44.84051	0.05455
46.15896	0.04377
47.54989	0.04412
48.79131	0.05455
49.87415	0.0675
51.19259	0.08218
52.27544	0.10197
53.35828	0.12003
54.44113	0.13379
55.5285	0.14089
56.4573	0.14375
57.46312	0.14767
58.70001	0.14422
59.62881	0.13212
60.40356	0.11172
61.33236	0.09995
62.49676	0.08693
63.5796	0.07237
64.73947	0.05704
65.59125	0.0465

66.59707	0.03856
67.68444	0.03095
68.61324	0.02679
69.54204	0.02537
70.00417	0.02691



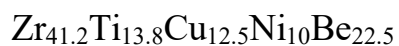
2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
20.00636	0.12147
21.0133	0.13188
22.2561	0.14872
23.41726	0.17303
24.66006	0.20306
25.82122	0.23842
26.82816	0.27713
27.60378	0.32002
28.4565	0.36593
28.84658	0.41206
29.46344	0.46212
30.00774	0.5201
30.31617	0.58256
30.62914	0.64659
31.09179	0.70037
31.32311	0.75101
31.55897	0.80223
31.8674	0.85872
32.17584	0.90741
32.4117	0.94418
32.72013	0.9633
33.18731	0.96967
33.41864	0.96632
33.72707	0.9472
33.88129	0.92004
34.27136	0.89232
34.50269	0.86163
34.81565	0.82058
35.12409	0.76794
35.43252	0.70799
35.8226	0.6511
36.05392	0.59802

36.43946	0.54183
36.75243	0.4726
37.21508	0.4056
37.91359	0.33926
38.6121	0.28361
39.2335	0.2354
40.00911	0.19797
41.09316	0.15798
42.17721	0.11983
43.26126	0.09223
44.34985	0.08194
45.35679	0.08126
46.51795	0.08231
47.602	0.0867
48.69058	0.10004
49.77463	0.11594
50.62736	0.13493
51.94273	0.15313
52.71835	0.17375
53.64818	0.19349
54.58255	0.21182
55.51239	0.22272
56.59643	0.21891
57.91181	0.20093
58.92329	0.17885
59.77601	0.16449
60.86006	0.14769
61.867	0.12677
62.64262	0.11276
63.57245	0.10236
64.57939	0.08483
66.20774	0.06014
66.98335	0.04459
67.9903	0.03486
69.07435	0.02989
69.84996	0.02628
70.08582	0.02442



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
25.13606	0.12176
25.96063	0.11248
26.97383	0.10894
28.17565	0.11045
29.18885	0.11633
30.20205	0.13568
31.30687	0.16972
32.22844	0.20721
33.24164	0.25248
33.97459	0.3097
34.71294	0.37597
35.07941	0.44645
35.54289	0.52354
36.09261	0.6038
36.46447	0.68137
36.83095	0.75696
37.47767	0.82174
37.93577	0.8734
38.39925	0.90101
38.58249	0.90523
38.85735	0.87711
39.32083	0.82376
39.77892	0.75358
40.23702	0.68627
40.60888	0.61996
40.97536	0.54978
41.34723	0.4796
41.98856	0.41279
42.7269	0.34854
43.46524	0.27854
44.28981	0.21843
45.11977	0.17107
46.13297	0.13458
47.3294	0.09937
48.62285	0.07364
49.9109	0.05849
51.3822	0.04955
53.04212	0.04516

54.33017	0.04668
55.99009	0.05596
57.46138	0.06827
58.75483	0.08312
60.1345	0.09321
61.69741	0.10446
63.26571	0.1107
64.46215	0.12094
65.84182	0.12564
67.04365	0.12867
68.3317	0.12179
69.43652	0.11138
70.63296	0.09535
71.73777	0.08612
72.56773	0.08194
73.94741	0.08413
75.42409	0.07553
76.62052	0.06743
78.18883	0.06136
79.29364	0.06287
80.39846	0.06338



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
24.7728	0.05351
26.35797	0.07789
28.35639	0.11046
30.46583	0.16117
32.14969	0.2607
33.42029	0.39395
34.36399	0.54971
35.52357	0.70656
36.68314	0.84091
37.52816	0.91569
38.16346	0.92796
38.68773	0.89895
39.42789	0.79797
40.69232	0.64543
41.74704	0.49549
43.01148	0.39826

44.38077	0.3148
45.85491	0.24668
47.64979	0.18452
49.12393	0.1486
50.59808	0.13339
52.60267	0.14315
54.18167	0.1656
56.29111	0.20308
57.87011	0.24263
59.76985	0.27962
61.45987	0.32463
63.35343	0.36502
65.25317	0.38456
67.14673	0.36637
68.62705	0.33773
70.3109	0.31917
72.00093	0.32001
73.47507	0.31243
75.05407	0.29897
76.63924	0.2946
78.11338	0.30297
79.06325	0.30588
79.90209	0.30697



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
24.92422	0.03048
26.06162	0.03102
27.19902	0.02991
28.33642	0.04114
29.56092	0.06455
30.52412	0.10522
31.22603	0.15164
32.18924	0.21128
32.89115	0.28249
33.50083	0.37176
33.94145	0.4652
34.55114	0.55175
34.99175	0.63114
35.25304	0.7142

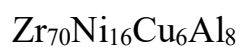
35.60656	0.79541
35.78076	0.86594
36.30335	0.91776
36.83106	0.94971
37.17945	0.96077
37.88136	0.94652
38.40395	0.90209
38.40395	0.82056
38.75747	0.73001
39.19296	0.64809
39.45938	0.57654
39.98197	0.50673
40.33036	0.43876
40.85807	0.36844
41.47288	0.29985
42.25677	0.24359
43.13287	0.2017
44.00898	0.16223
44.97218	0.12541
46.376	0.09507
47.5134	0.07416
48.56371	0.06432
49.70111	0.06164
50.75141	0.06271
51.97591	0.06217
53.02621	0.06378
54.25583	0.0679
55.48033	0.07685
56.44354	0.08401
57.49384	0.0999
58.71834	0.12115
59.59444	0.14603
60.64474	0.16226
61.60795	0.17798
62.65825	0.18568
63.36016	0.18317
64.14917	0.16742
65.37367	0.15507
66.51107	0.14755
67.74069	0.1483
69.05229	0.13744

70.45098	0.12724
71.59351	0.11261
72.73091	0.10405
74.0425	0.09242
75.1799	0.0883
76.40953	0.08884
77.80822	0.09188
78.68433	0.09618
79.38624	0.09886
79.73463	0.10065

Pd₈₂Si₁₈

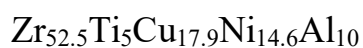
2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
28.39914	0.02649
29.56382	0.02876
30.91604	0.04005
32.2674	0.05589
33.53319	0.09131
34.62227	0.14178
35.71459	0.20131
36.62831	0.27877
37.45326	0.36108
37.81816	0.45674
38.37164	0.54821
38.73756	0.6432
39.29259	0.72883
39.65955	0.80894
40.12425	0.86541
40.49218	0.8955
40.76841	0.89684
41.23477	0.86139
41.51168	0.79597
41.97374	0.71787
42.53462	0.63247
43.18942	0.5348
43.74717	0.4337
44.49802	0.34363
45.34445	0.26692
46.2874	0.204
47.23367	0.15542

48.37262	0.11677
49.51668	0.08463
50.76159	0.06391
52.30135	0.05324
53.76021	0.04318
55.02801	0.03341
56.30316	0.02942
57.48743	0.02741
58.97584	0.02424
60.48114	0.03155
62.19371	0.0519
63.8261	0.07886
65.36444	0.10894
67.02576	0.13846
68.488	0.16676
70.27952	0.19755
72.09727	0.20969
73.60602	0.2056
74.91207	0.19345
75.46337	0.17116



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
28.60669	0.0578
29.59601	0.08244
30.76716	0.1223
31.76153	0.1715
32.66811	0.25787
33.66726	0.37242
34.30639	0.49682
34.66905	0.62199
35.30992	0.75644
35.67359	0.87022
36.13405	0.93596
36.86882	0.90911
37.4169	0.81585
37.8797	0.68502
38.52115	0.56312
39.16925	0.4473
39.81325	0.35563

40.83334	0.28303
41.67147	0.21458
42.79081	0.15618
43.72778	0.10494
45.04254	0.07293
46.36912	0.04904
47.69675	0.03841
49.22162	0.03204
50.47413	0.03387
51.92001	0.03387
53.47175	0.03387
55.0399	0.03296
56.41692	0.03474
57.80287	0.04567
59.30361	0.06558
60.50875	0.08907
62.12525	0.10861
63.65965	0.12117
65.20087	0.11749
66.44466	0.10254
68.01043	0.06986
69.49156	0.04322
71.19267	0.03014
72.80443	0.03296
74.10724	0.03663
75.42777	0.04337



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
24.84608	0.06734
26.34524	0.06898
27.94325	0.07232
29.16235	0.08076
29.81583	0.09844
30.84822	0.12505
31.60055	0.15471
32.16616	0.18402
32.53958	0.21533
33.00635	0.2488
33.29191	0.28165

33.57197	0.31459
33.85204	0.3501
34.23094	0.38775
34.51101	0.42386
34.60436	0.46287
34.79107	0.50386
35.07113	0.54666
35.35669	0.58689
35.35669	0.62706
35.5434	0.66495
35.82346	0.70465
36.01017	0.74269
36.10353	0.78006
36.29573	0.81592
36.57579	0.85002
36.57579	0.87994
36.85585	0.90941
37.13592	0.93214
37.42147	0.94305
37.60818	0.9412
37.79489	0.93303
37.9816	0.91673
38.26166	0.89429
38.36051	0.86721
38.54721	0.83795
38.73392	0.80815
38.92063	0.77638
39.10734	0.74678
39.2007	0.71897
39.3929	0.69478
39.57961	0.66989
39.67296	0.642
39.76631	0.61166
39.95302	0.57906
40.13973	0.54946
40.32644	0.51927
40.612	0.48663
40.89206	0.44917
41.07877	0.41264
41.45768	0.37936
41.64439	0.34256

42.0178	0.30443
42.39122	0.26639
42.77013	0.23256
43.2369	0.20106
43.61581	0.17338
44.17594	0.14836
44.83491	0.12606
45.39504	0.10642
46.24072	0.08782
47.17975	0.07056
48.11879	0.0567
49.15118	0.04607
50.27693	0.04054
51.12261	0.03849
52.155	0.04054
53.5608	0.04328
54.87326	0.0469
56.00449	0.05167
57.31695	0.06128
58.53605	0.07575
59.8485	0.09158
60.88089	0.10786
62.00664	0.12281
63.13238	0.13631
64.07142	0.1445
64.9171	0.149
65.94949	0.14586
66.88852	0.1367
68.01427	0.12347
68.85995	0.1125
69.98569	0.10082
71.11144	0.08822
72.51725	0.07517
73.92855	0.06721
75.241	0.06211
76.4601	0.05992
77.39914	0.05762
78.43153	0.05688
79.37056	0.05633
80.02953	0.05613



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
30.20712	0.04723
30.75556	0.0868
31.53708	0.12644
32.15864	0.16737
32.55169	0.20511
32.94017	0.24701
33.33321	0.28394
33.72169	0.33945
34.03247	0.41062
34.42552	0.50118
34.7363	0.60368
35.28473	0.71165
35.36243	0.80645
35.67321	0.88046
36.06626	0.93128
36.37704	0.94908
36.77008	0.95401
37.00317	0.94419
37.23626	0.90651
37.78469	0.84674
37.94008	0.78114
38.25086	0.70766
38.64391	0.63365
39.18778	0.56437
39.65852	0.49418
40.20696	0.42536
40.75082	0.36801
41.37696	0.30952
42.00309	0.25281
42.70235	0.21328
43.40617	0.18849
44.26539	0.14967
45.20231	0.11779
45.82844	0.09862
46.76535	0.09209
47.46918	0.08317
48.2507	0.08035
49.18762	0.07073

50.12453	0.06275
50.82836	0.06181
51.84297	0.06533
52.77988	0.06745
53.71679	0.07073
54.96906	0.07566
55.75058	0.08176
56.6098	0.08646
57.38675	0.09627
58.09058	0.10841
58.8721	0.12882
59.65363	0.14448
60.51284	0.15547
61.60515	0.15758
62.38667	0.1665
63.0905	0.17729
63.79433	0.18222
64.49815	0.18081
65.35737	0.18222
66.68276	0.17729
67.38659	0.1672
68.24581	0.15547
68.94964	0.14796
70.11963	0.13974
71.21194	0.13083
72.38651	0.12472
73.32342	0.12336
74.57112	0.12249
75.97877	0.11263
76.83799	0.10308
77.61951	0.09256
78.55643	0.08599
79.10029	0.08035
79.72643	0.07941
80.19717	0.08317

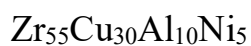


2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
20.22461	0.1306
20.89062	0.13209

21.75251	0.13487
22.89983	0.13947
23.95201	0.14409
25.00419	0.15019
26.53209	0.15838
27.58427	0.16406
28.54131	0.17032
29.78937	0.17885
30.64567	0.18992
31.12698	0.20223
31.50756	0.22121
31.89373	0.24291
32.17916	0.26792
32.65488	0.30224
33.1362	0.34337
33.42163	0.38558
33.80221	0.42628
33.89735	0.46436
33.99249	0.4993
34.28352	0.5372
34.37867	0.57923
34.6641	0.62078
34.75924	0.66434
35.24056	0.7068
35.3357	0.74904
35.43085	0.79097
35.71628	0.83822
35.90657	0.87848
36.00171	0.90707
36.38788	0.92224
36.67331	0.93147
37.14903	0.9301
37.44006	0.91083
37.72549	0.87761
37.91578	0.8376
38.10607	0.79638
38.58739	0.7528
38.58739	0.70374
38.96796	0.65447
39.15825	0.61135
39.54442	0.56692

39.54442	0.51636
40.11529	0.46493
40.40631	0.4235
40.69175	0.37585
41.16747	0.31306
42.1245	0.25759
42.51067	0.22416
42.98639	0.20257
43.46211	0.17074
44.03857	0.13771
44.99561	0.10695
45.8575	0.08281
46.7138	0.06173
47.86672	0.04283
49.01404	0.03105
50.06622	0.02863
51.1184	0.02944
52.17058	0.02994
53.22276	0.03306
54.46523	0.03874
55.61255	0.04518
56.3793	0.05102
57.52662	0.05738
58.67395	0.06634
59.72613	0.08519
61.44431	0.10605
62.78752	0.12025
64.02999	0.12226
65.17731	0.11319
66.13435	0.09694
67.09139	0.08204
67.85254	0.07177
68.80957	0.06129
69.86175	0.05048
70.6285	0.04317
71.68068	0.03822
72.54257	0.03691
73.88018	0.03449
75.12265	0.03022
76.07969	0.02306
77.13187	0.01851

78.0889	0.0172
78.9508	0.01581
80.00298	0.01528



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
25.33606	0.05921
26.2854	0.03747
27.32913	0.03599
28.27848	0.0345
29.51096	0.04491
30.55469	0.06475
31.59841	0.09243
32.45338	0.12006
33.21397	0.19039
34.06338	0.28125
34.63521	0.40599
35.30142	0.53022
35.77332	0.64381
36.24521	0.75962
36.81704	0.8661
37.28894	0.94273
37.76639	0.95652
38.14391	0.94818
38.62136	0.88832
38.9045	0.78824
39.47632	0.67059
40.0426	0.55528
40.80319	0.46815
41.56378	0.39061
42.31881	0.32291
42.98502	0.27183
43.83999	0.23181
44.6894	0.18636
45.73313	0.14237
46.77686	0.12303
47.82058	0.10532
48.96424	0.09252
49.90803	0.08657
51.05169	0.09401

52.09542	0.10244
53.23352	0.1069
54.37163	0.1155
55.41535	0.13106
56.45908	0.15526
57.3085	0.17595
58.35222	0.20214
59.39595	0.2438
60.15654	0.27554
61.38902	0.29674
62.62706	0.32009
63.47647	0.33134
64.61458	0.34905
65.56393	0.3564
66.70203	0.37078
67.557	0.3807
68.50635	0.38096
69.55007	0.38569
70.5938	0.3918
71.7319	0.38944
72.96439	0.3779
73.91373	0.36275
75.05184	0.34816
76.00119	0.33343
76.95053	0.31731
78.94361	0.2959
79.79857	0.28855



2θ, град	I_{exp}, отн. ед.
24.86416	0.05743
26.00226	0.05013
27.14037	0.04497
28.1841	0.0411
29.22782	0.05786
30.9322	0.09862
31.88155	0.1505
32.54776	0.20113
33.21397	0.27437
33.68587	0.35975

34.25769	0.43815
34.91835	0.51879
35.01273	0.62075
35.58456	0.74691
36.15084	0.85122
36.72266	0.91462
37.28894	0.93432
37.48325	0.94463
37.86077	0.93568
38.52698	0.88509
38.9045	0.79491
39.37639	0.69768
39.94822	0.59517
40.70881	0.49601
41.27509	0.42409
41.94129	0.36713
42.70188	0.31857
43.65123	0.27872
44.50064	0.23754
45.26123	0.1955
45.92744	0.18065
47.82058	0.16699
48.86431	0.16523
49.81365	0.1666
50.763	0.1666
51.61797	0.1666
52.47294	0.1666
53.61104	0.16523
54.84353	0.16941
55.79287	0.17972
56.74222	0.20151
57.59719	0.22121
58.64091	0.25172
59.59026	0.28138
60.53961	0.30287
61.4834	0.31532
62.43275	0.32002
63.09896	0.32899
63.95392	0.33725
64.80889	0.34337
65.46955	0.34422

66.23013	0.3397
67.17948	0.33545
68.03445	0.32264
68.98379	0.29814
70.31066	0.26504
71.26001	0.24914
72.20935	0.24012
73.25308	0.2292
74.20242	0.22535
74.95746	0.21653
75.52929	0.21519
76.47864	0.21132
77.42798	0.21132
78.37178	0.21648
79.03799	0.22207
79.89295	0.2298

Приложение №3. Атомные факторы элементов

Табл. 1. Pd

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{Å}^{-1})$)	Pd 46 f
0	46
0.005	45.992
0.01	45.969
0.015	45.93
0.02	45.875
0.025	45.805
0.03	45.72
0.04	45.507
0.05	45.238
0.07	44.545
0.09	43.675
0.1	43.685
0.125	41.838
0.15	40.366
0.175	38.829
0.2	37.274
0.25	34.239
0.3	31.444
0.4	26.836
0.5	23.472
0.6	21.036
0.7	19.169
0.8	17.589
0.9	16.134
1	14.747
1.25	11.591
1.5	9.0843
2	6.2974
2.5	5.1029
3	4.3373
3.5	3.5716
4	3.0394
5	1.9751
6	1.4788

Табл. 2. Pd

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{Å}^{-1})$)	Pd 46 f
0.16	39.750
0.17	39.137
0.18	38.520
0.19	37.902
0.20	37.286
0.22	36.064
0.24	34.868
0.25	34.283
0.26	33.708
0.28	32.592
0.30	31.523
0.32	30.505
0.34	29.540
0.35	29.077
0.36	28.628
0.38	27.769
0.40	26.961
0.42	26.202
0.44	25.491
0.45	25.153
0.46	24.825
0.48	24.201
0.50	23.617
0.55	22.307
0.60	21.177
0.65	20.186
0.70	19.296
0.80	17.711
0.90	16.266
1.00	14.893
1.10	13.580
1.20	12.342
1.30	11.200
1.40	10.173

7	1.2248
8	1.1038
10	0.8618
15	0.4708
20	0.24597
50	0.01552
80	0.00317
100	0.00148
1000	9.554E-7
1000000	1.867E-15
1E9	4.1612E-24

1.50	9.270
1.60	8.492
1.70	7.833
1.80	7.282
1.90	6.824
2.00	6.443
2.50	5.240
3.00	4.460
3.50	3.740
4.00	3.080
5.00	2.100
6.00	1.575

Табл. 1. Ni

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Ni 28 f
0	28
0.005	27.984
0.01	27.963
0.015	27.938
0.02	27.89
0.025	27.829
0.03	27.755
0.04	27.573
0.05	27.353
0.07	26.793
0.09	26.139
0.1	25.795
0.125	24.88
0.15	23.946
0.175	23.039
0.2	22.135
0.25	20.38
0.3	18.689
0.4	15.542
0.5	12.918
0.6	10.868
0.7	9.3425
0.8	8.2495

Табл. 2. Ni

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Ni 28 f
0.16	23.604
0.17	23.237
0.18	22.872
0.19	22.510
0.20	22.150
0.22	21.438
0.24	20.737
0.25	20.390
0.26	20.046
0.28	19.365
0.30	18.696
0.32	18.040
0.34	17.398
0.35	17.084
0.36	16.773
0.38	16.165
0.40	15.576
0.42	15.008
0.44	14.461
0.45	14.196
0.46	13.937
0.48	13.435
0.50	12.956

0.9	7.4741
1	6.906
1.25	5.9013
1.5	5.0914
2	3.5901
2.5	2.4929
3	1.9882
3.5	1.4835
4	1.3391
5	1.0502
6	0.8724
7	0.7138
8	0.5972
10	0.3641
15	0.12411
20	0.0505
50	0.00196
80	3.4779E-4
100	1.5384E-4
1000	6.1696E-8
1000000	6.6171E-17
1E9	8.854E-26

0.55	11.862
0.60	10.909
0.65	10.090
0.70	9.392
0.80	8.301
0.90	7.519
1.00	6.944
1.10	6.495
1.20	6.118
1.30	5.776
1.40	5.451
1.50	5.133
1.60	4.819
1.70	4.511
1.80	4.211
1.90	3.922
2.00	3.647
2.50	2.543
3.00	1.878
3.50	1.512
4.00	1.306
5.00	1.069
6.00	0.892

Табл. 1. P

Элемент Z (sin[θ/2])/λ(Å⁻¹)	P 15 f
0	15
0.005	14.993
0.01	14.976
0.015	14.949
0.02	14.909
0.025	14.859
0.03	14.798
0.04	14.646
0.05	14.458
0.07	13.989
0.09	13.433
0.1	13.135

Табл. 2. P

Элемент Z (sinθ)/λ(Å⁻¹)	P 15 f
0.16	11.345
0.17	11.072
0.18	10.811
0.19	10.563
0.20	10.327
0.22	9.894
0.24	9.510
0.25	9.335
0.26	9.170
0.28	8.869
0.30	8.600
0.32	8.357

0.125	12.71
0.15	11.623
0.175	10.934
0.2	10.32
0.25	9.3268
0.3	8.5909
0.4	7.5406
0.5	6.6672
0.6	5.8182
0.7	5.0079
0.8	4.2732
0.9	3.6377
1	3.11
1.25	2.216
1.5	1.7379
2	1.3287
2.5	1.1174
3	0.9445
3.5	0.7717
4	0.65
5	0.4065
6	0.2638
7	0.1741
8	0.1354
10	0.0579
15	0.01438
20	0.00497
50	1.4826E-4
80	2.4296E-5
100	1.0362E-5
1000	2.7444E-9
1000000	2.0226E-18
1E9	2.1966E-27

0.34	8.134
0.35	8.029
0.36	7.928
0.38	7.733
0.40	7.547
0.42	7.367
0.44	7.190
0.45	7.103
0.46	7.017
0.48	6.845
0.50	6.674
0.55	6.250
0.60	5.829
0.65	5.418
0.70	5.020
0.80	4.284
0.90	3.649
1.00	3.122
1.10	2.698
1.20	2.364
1.30	2.104
1.40	1.903
1.50	1.747
1.60	1.626
1.70	1.530
1.80	1.453
1.90	1.389
2.00	1.333
2.50	1.122
3.00	0.942
3.50	0.777
4.00	0.632
5.00	0.411
6.00	0.268

Табл. 1. Au

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{Å}^{-1})$)	Au 79 f
0	79
0.005	78.976
0.01	78.941
0.015	78.894
0.02	78.812
0.025	78.708
0.03	78.581
0.04	78.266
0.05	77.882
0.07	76.884
0.09	75.677
0.1	75.016
0.125	73.205
0.15	71.247
0.175	69.232
0.2	67.164
0.25	63.044
0.3	59.108
0.4	52.138
0.5	46.48
0.6	41.801
0.7	37.775
0.8	34.196
0.9	30.961
1	28.033
1.25	22.129
1.5	18.26
2	14.125
2.5	11.469
3	9.3158
3.5	7.1623
4	6.2738
5	4.4968
6	3.711
7	3.0236
8	2.5607

Табл. 2. Au

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{Å}^{-1})$)	Au 79 f
0.16	70.575
0.17	69.761
0.18	68.941
0.19	68.119
0.20	67.296
0.22	65.657
0.24	64.039
0.25	63.241
0.26	62.452
0.28	60.902
0.30	59.395
0.32	57.935
0.34	56.523
0.35	55.835
0.36	55.160
0.38	53.846
0.40	52.581
0.42	51.363
0.44	50.191
0.45	49.622
0.46	49.063
0.48	47.976
0.50	46.929
0.55	44.469
0.60	42.207
0.65	40.110
0.70	38.153
0.80	34.581
0.90	31.387
1.00	28.530
1.10	25.998
1.20	23.789
1.30	21.892
1.40	20.287
1.50	18.943
1.60	17.821

10	1.635
15	1.1728
20	0.85415
50	0.14064
80	0.04038
100	0.02169
1000	3.7094E-5
1000000	4.3841E-13
1E9	5.4851E-21

1.70	16.880
1.80	16.081
1.90	15.388
2.00	14.770
2.50	12.168
3.00	9.826
3.50	7.878
4.00	6.489
5.00	5.010
6.00	4.244

Табл. 1. Cu

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Cu 29 f
0	29
0.005	28.984
0.01	28.967
0.015	28.947
0.02	28.906
0.025	28.854
0.03	28.791
0.04	28.635
0.05	28.448
0.07	27.962
0.09	27.387
0.1	27.081
0.125	26.243
0.15	25.356
0.175	24.461
0.2	23.538
0.25	21.688
0.3	19.869
0.4	16.481
0.5	13.667
0.6	11.464
0.7	9.8091
0.8	8.6078
0.9	7.7492
1	7.1235

Табл. 2. Cu

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Cu 29 f
0.16	25.009
0.17	24.645
0.18	24.278
0.19	23.910
0.20	23.540
0.22	22.798
0.24	22.057
0.25	21.687
0.26	21.319
0.28	20.589
0.30	19.869
0.32	19.162
0.34	18.472
0.35	18.133
0.36	17.799
0.38	17.145
0.40	16.514
0.42	15.904
0.44	15.318
0.45	15.034
0.46	14.757
0.48	14.219
0.50	13.707
0.55	12.533
0.60	11.507

1.25	6.0619
1.5	5.2648
2	3.7933
2.5	2.6641
3	2.1103
3.5	1.5566
4	1.3989
5	1.0834
6	0.907
7	0.7498
8	0.6308
10	0.3929
15	0.13827
20	0.05705
50	0.00227
80	4.0527E-4
100	1.7979E-4
1000	7.4126E-8
1000000	8.1828E-17
1E9	1.1186E-25

0.65	10.621
0.70	9.861
0.80	8.663
0.90	7.799
1.00	7.166
1.10	6.681
1.20	6.285
1.30	5.939
1.40	5.617
1.50	5.308
1.60	5.005
1.70	4.705
1.80	4.413
1.90	4.128
2.00	3.855
2.50	2.721
3.00	2.001
3.50	1.590
4.00	1.358
5.00	1.105
6.00	0.929

Табл. 1. Ag

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Ag 47 f
0	47
0.005	46.987
0.01	46.959
0.015	46.917
0.02	46.852
0.025	46.77
0.03	46.672
0.04	46.425
0.05	46.123
0.07	45.356
0.09	44.435
0.1	43.93
0.125	42.576
0.15	41.131

Табл. 2. Ag

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Ag 47 f
0.16	40.563
0.17	39.964
0.18	39.361
0.19	38.758
0.20	38.154
0.22	36.955
0.24	35.774
0.25	35.192
0.26	34.619
0.28	33.498
0.30	32.416
0.32	31.378
0.34	30.387
0.35	29.910

0.175	39.643
0.2	38.137
0.25	35.153
0.3	32.341
0.4	27.576
0.5	24.019
0.6	21.44
0.7	19.509
0.8	17.927
0.9	16.504
1	15.156
1.25	12.045
1.5	9.479
2	6.4852
2.5	5.2013
3	4.4433
3.5	3.6852
4	3.143
5	2.0585
6	1.5278
7	1.2543
8	1.1303
10	0.8822
15	0.4936
20	0.26123
50	0.01697
80	0.00349
100	0.00164
1000	1.0857E-6
1000000	2.2074E-15
1E9	5.1019E-24

0.36	29.444
0.38	28.551
0.40	27.707
0.42	26.911
0.44	26.163
0.45	25.805
0.46	25.459
0.48	24.800
0.50	24.181
0.55	22.795
0.60	21.607
0.65	20.575
0.70	19.661
0.80	18.069
0.90	16.651
1.00	15.316
1.10	14.035
1.20	12.813
1.30	11.669
1.40	10.623
1.50	9.687
1.60	8.869
1.70	8.165
1.80	7.569
1.90	7.069
2.00	6.651
2.50	5.351
3.00	4.566
3.50	3.862
4.00	3.207
5.00	2.206
6.00	1.635

Табл. 1. Si

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{Å}^{-1})$)	Si 14 f
0	14
0.005	13.993
0.01	13.975

Табл. 2. Si

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{Å}^{-1})$)	Si 14 f
0.16	10.525
0.17	10.293
0.18	10.074

0.015	13.946
0.02	13.905
0.025	13.852
0.03	13.788
0.04	13.531
0.05	13.439
0.07	12.966
0.09	12.423
0.1	12.139
0.125	11.432
0.15	10.769
0.175	10.179
0.2	9.6693
0.25	8.8521
0.3	8.2232
0.4	7.1977
0.5	6.2324
0.6	5.3031
0.7	4.461
0.8	3.7411
0.9	3.1541
1	2.6922
1.25	1.9595
1.5	1.5925
2	1.2604
2.5	1.0513
3	0.8725
3.5	0.6936
4	0.5774
5	0.345
6	0.2189
7	0.1416
8	0.1096
10	0.0456
15	0.01112
20	0.0038
50	1.1169E-4
80	1.8205E-5
100	7.7437E-6
1000	1.9718E-9
1000000	1.4048E-18
1E9	1.5094E-27

0.19	9.868
0.20	9.673
0.22	9.319
0.24	9.004
0.25	8.859
0.26	8.722
0.28	8.467
0.30	8.231
0.32	8.011
0.34	7.800
0.35	7.698
0.36	7.597
0.38	7.398
0.40	7.202
0.42	7.008
0.44	6.815
0.45	6.719
0.46	6.662
0.48	6.431
0.50	6.240
0.55	5.769
0.60	5.312
0.65	4.878
0.70	4.470
0.80	3.750
0.90	3.164
1.00	2.702
1.10	2.346
1.20	2.076
1.30	1.872
1.40	1.717
1.50	1.598
1.60	1.505
1.70	1.430
1.80	1.367
1.90	1.313
2.00	1.264
2.50	1.056
3.00	0.867
3.50	0.699
4.00	0.566
5.00	0.349
6.00	0.222

Табл. 1. Zr

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Zr 40 f
0	40
0.005	39.982
0.01	39.944
0.015	39.884
0.02	39.796
0.025	39.683
0.03	39.549
0.04	39.221
0.05	38.831
0.07	37.889
0.09	36.849
0.1	36.313
0.125	34.995
0.15	33.719
0.175	32.496
0.2	31.322
0.25	29.078
0.3	27.008
0.4	23.518
0.5	20.808
0.6	18.614
0.7	16.688
0.8	14.911
0.9	13.265
1	11.778
1.25	8.8899
1.5	7.1491
2	5.4599
2.5	4.4766
3	3.6453
3.5	2.8139
4	2.3913
5	1.5461
6	1.2386
7	1.0701
8	0.9526

Табл. 2. Zr

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Zr 40 f
0.16	33.263
0.17	32.776
0.18	32.298
0.19	31.827
0.20	31.363
0.22	30.454
0.24	29.572
0.25	29.141
0.26	28.716
0.28	27.889
0.30	27.092
0.32	26.327
0.34	25.596
0.35	25.243
0.36	24.899
0.38	24.236
0.40	23.606
0.42	23.008
0.44	22.439
0.45	22.166
0.46	21.899
0.48	21.384
0.50	20.892
0.55	19.745
0.60	18.693
0.65	17.706
0.70	16.767
0.80	14.996
0.90	13.361
1.00	11.883
1.10	10.588
1.20	9.486
1.30	8.574
1.40	7.833
1.50	7.238
1.60	6.760

10	0.7175
15	0.33856
20	0.16319
50	0.00867
80	0.00168
100	7.7249E-4
1000	4.2572E-7
1000000	6.6606E-16
1E9	1.2154E-24

1.70	6.375
1.80	6.059
1.90	5.790
2.00	5.558
2.50	4.590
3.00	3.720
3.50	2.920
4.00	2.335
5.00	1.620
6.00	1.285

Табл. 1. Al

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Al 13 f
0	13
0.005	12.992
0.01	12.974
0.015	12.945
0.02	12.903
0.025	12.849
0.03	12.785
0.04	12.628
0.05	12.439
0.07	11.984
0.09	11.481
0.1	11.225
0.125	10.61
0.15	10.054
0.175	9.5711
0.2	9.1552
0.25	8.4606
0.3	7.8674
0.4	6.7617
0.5	5.6864
0.6	4.7049
0.7	3.8742
0.8	3.2115
0.9	2.7041
1	2.3248

Табл. 2. Al

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Al 13 f
0.16	9.857
0.17	9.667
0.18	9.487
0.19	9.318
0.20	9.158
0.22	8.862
0.24	8.592
0.25	8.465
0.26	8.341
0.28	8.103
0.30	7.873
0.32	7.648
0.34	7.426
0.35	7.316
0.36	7.205
0.38	6.985
0.40	6.766
0.42	6.548
0.44	6.330
0.45	6.222
0.46	6.115
0.48	5.902
0.50	5.692
0.55	5.186
0.60	4.713

1.25	1.7537
1.5	1.4812
2	1.1924
2.5	0.9755
3	0.7931
3.5	0.6107
4	0.5025
5	0.286
6	0.1766
7	0.113
8	0.087
10	0.0349
15	0.00841
20	0.00285
50	8.2435E-5
80	1.3365E-5
100	5.6698E-6
1000	1.3856E-9
1000000	9.523E-19
1E9	1.013E-27

0.65	4.277
0.70	3.883
0.80	3.221
0.90	2.712
1.00	2.330
1.10	2.049
1.20	1.841
1.30	1.687
1.40	1.571
1.50	1.481
1.60	1.408
1.70	1.346
1.80	1.292
1.90	1.243
2.00	1.195
2.50	0.979
3.00	0.783
3.50	0.615
4.00	0.478
5.00	0.290
6.00	0.179

Табл. 1. Ti

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Ti 22 f
0	22
0.005	21.986
0.01	21.959
0.015	21.918
0.02	21.855
0.025	21.775
0.03	21.68
0.04	21.447
0.05	21.171
0.07	20.501
0.09	19.769
0.1	19.395
0.125	18.485
0.15	17.618

Табл. 2. Ti

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Ti 22 f
0.16	17.304
0.17	16.980
0.18	16.663
0.19	16.351
0.20	16.044
0.22	15.444
0.24	14.859
0.25	14.572
0.26	14.289
0.28	13.735
0.30	13.198
0.32	12.682
0.34	12.187
0.35	11.949

0.175	16.806
0.2	16.035
0.25	14.555
0.3	13.174
0.4	10.829
0.5	9.1224
0.6	7.9786
0.7	7.2173
0.8	6.6571
0.9	6.1785
1	5.7254
1.25	4.6267
1.5	3.6237
2	2.2651
2.5	1.619
3	1.3893
3.5	1.1596
4	1.0424
5	0.808
6	0.6152
7	0.4603
8	0.3712
10	0.1931
15	0.05653
20	0.0212
50	7.1996E-4
80	1.2285E-4
100	5.3415E-5
1000	1.798E-8
1000000	1.6297E-17
1E9	1.9489E-26

0.36	11.717
0.38	11.271
0.40	10.852
0.42	10.459
0.44	10.093
0.45	9.920
0.46	9.753
0.48	9.438
0.50	9.148
0.55	8.518
0.60	8.007
0.65	7.588
0.70	7.240
0.80	6.676
0.90	6.200
1.00	5.752
1.10	5.310
1.20	4.872
1.30	4.445
1.40	4.038
1.50	3.660
1.60	3.316
1.70	3.006
1.80	2.734
1.90	2.496
2.00	2.290
2.50	1.637
3.00	1.338
3.50	1.171
4.00	1.044
5.00	0.821
6.00	0.627

Табл. 1. Be

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Be 4 f
0	4
0.005	3.997
0.01	3.988

Табл. 2. Be

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Be 4 f
0.16	2.365
0.17	2.277
0.18	2.197

0.015	3.9732	0.19	2.125
0.02	3.9525	0.20	2.060
0.025	3.9264	0.22	1.951
0.03	3.8947	0.24	1.864
0.04	3.8168	0.25	1828
0.05	3.7215	0.26	1.795
0.07	3.4924	0.28	1.739
0.09	3.2325	0.30	1.692
0.1	3.0976	0.32	1.652
0.125	2.7844	0.34	1.616
0.15	2.4921	0.35	1.600
0.175	2.2629	0.36	1.583
0.2	2.0771	0.38	1.551
0.25	1.8354	0.40	1.520
0.3	1.6951	0.42	1.489
0.4	1.5195	0.44	1.458
0.5	1.3603	0.45	1.443
0.6	1.193	0.46	1.427
0.7	1.0277	0.48	1.395
0.8	0.8743	0.50	1.362
0.9	0.73812	0.55	1.279
1	0.6206	0.60	1.195
1.25	0.42798	0.65	1.112
1.5	0.26235	0.70	1.030
2	0.11962	0.80	0.876
2.5	0.05995	0.90	0.740
3	0.03272	1.00	0.622
3.5	0.01909	1.10	0.522
4	0.01181	1.20	0.439
5	0.00515	1.30	0.369
6	0.00257	1.40	0.311
7	0.00142	1.50	0.263
8	8.4309E-4	1.60	0.223
10	3.5136E-4	1.70	0.190
15	7.0738E-5	1.80	0.163
20	2.2575E-5	1.90	0.139
50	5.9153E-7	2.00	0.120
80	9.1828E-8	2.50	0.060
100	3.8027E-8	3.00	0.033
1000	5.6197E-12	3.50	0.019
1000000	2.0249E-21	4.00	0.012
1E9	2.0332E-30	5.00	0.005
		6.00	0.003

Табл. 1. La

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	La 57 f
0	57
0.005	56.954
0.01	56.909
0.015	56.827
0.02	56.695
0.025	56.53
0.03	56.333
0.04	55.856
0.05	55.309
0.07	53.989
0.09	52.587
0.1	51.867
0.125	50.125
0.15	48.4
0.175	46.717
0.2	45.074
0.25	41.887
0.3	38.997
0.4	34.207
0.5	30.345
0.6	27.01
0.7	24.133
0.8	21.74
0.9	19.812
1	18.273
1.25	15.469
1.5	13.202
2	9.2253
2.5	6.6302
3	5.6045
3.5	4.5788
4	4.0446
5	2.9761
6	2.1731
7	1.6608
8	1.4633

Табл. 2. La

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	La 57 f
0.16	47.849
0.17	47.182
0.18	46.519
0.19	45.862
0.20	45.212
0.22	43.932
0.24	42.686
0.25	42.078
0.26	41.481
0.28	40.321
0.30	39.212
0.32	38.153
0.34	37.145
0.35	36.659
0.36	36.185
0.38	35.270
0.40	34.397
0.42	33.562
0.44	32.760
0.45	32.370
0.46	31.988
0.48	31.243
0.50	30.523
0.55	28.817
0.60	27.231
0.65	25.759
0.70	24.401
0.80	22.031
0.90	20.106
1.00	18.561
1.10	17.300
1.20	16.227
1.30	15.265
1.40	14.362
1.50	13.489
1.60	12.636

10	1.0683
15	0.7236
20	0.43155
50	0.03766
80	0.00851
100	0.00415
1000	3.5947E-6
1000000	1.1368E-14
1E9	3.9747E-23

1.70	11.807
1.80	11.009
1.90	10.253
2.00	9.550
2.50	6.917
3.00	5.550
3.50	4.820
4.00	4.270
5.00	3.240
6.00	2.410

Табл. 1. Се

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Се 58 f
0	58
0.005	57.963
0.01	57.909
0.015	57.831
0.02	57.702
0.025	57.54
0.03	57.346
0.04	56.878
0.05	56.342
0.07	55.036
0.09	53.645
0.1	52.929
0.125	51.188
0.15	49.454
0.175	47.763
0.2	46.103
0.25	42.862
0.3	39.9
0.4	34.951
0.5	30.981
0.6	27.573
0.7	24.626
0.8	22.163
0.9	20.169
1	18.576

Табл. 2. Се

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Се 58 f
0.16	48.901
0.17	48.227
0.18	47.557
0.19	46.892
0.20	46.233
0.22	44.933
0.24	43.663
0.25	43.042
0.26	42.432
0.28	41.244
0.30	40.104
0.32	39.014
0.34	37.975
0.35	37.474
0.36	36.985
0.38	36.040
0.40	35.139
0.42	34.277
0.44	33.451
0.45	33.051
0.46	32.658
0.48	31.893
0.50	31.154
0.55	29.409
0.60	27.791

1.25	15.724
1.5	13.483
2	9.5267
2.5	6.8321
3	5.7439
3.5	4.6557
4	4.1253
5	3.0644
6	2.2471
7	1.7128
8	1.5038
10	1.0858
15	0.74625
20	0.44995
50	0.04044
80	0.00923
100	0.00452
1000	4.0254E-6
1000000	1.337E-14
1E9	4.8975E-23

0.65	26.289
0.70	24.901
0.80	22.469
0.90	20.481
1.00	18.881
1.10	17.583
1.20	16.491
1.30	15.526
1.40	14.633
1.50	13.776
1.60	12.939
1.70	12.123
1.80	11.333
1.90	10.576
2.00	9.868
2.50	7.117
3.00	5.663
3.50	4.910
4.00	4.360
5.00	3.340
6.00	2.490

Табл. 1. Co

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Co 27 f
0	27
0.005	26.983
0.01	26.962
0.015	26.935
0.02	26.885
0.025	26.822
0.03	26.745
0.04	26.556
0.05	26.329
0.07	25.751
0.09	25.082
0.1	24.732
0.125	23.808
0.15	22.874

Табл. 2. Co

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Co 27 f
0.16	22.533
0.17	22.168
0.18	21.806
0.19	21.448
0.20	21.093
0.22	20.393
0.24	19.704
0.25	19.364
0.26	19.027
0.28	18.361
0.30	17.709
0.32	17.072
0.34	16.450
0.35	16.145

0.175	21.972
0.2	21.079
0.25	19.352
0.3	17.698
0.4	14.659
0.5	12.172
0.6	10.27
0.7	8.8843
0.8	7.9086
0.9	7.2189
1	6.7043
1.25	5.7358
1.5	4.899
2	3.3726
2.5	2.3226
3	1.8698
3.5	1.417
4	1.2831
5	1.0154
6	0.8353
7	0.6731
8	0.5593
10	0.3317
15	0.11077
20	0.04444
50	0.00169
80	2.9693E-4
100	1.3096E-4
1000	5.1071E-8
1000000	5.3236E-17
1E9	6.9775E-26

0.36	15.845
0.38	15.260
0.40	14.695
0.42	14.151
0.44	13.630
0.45	13.379
0.46	13.133
0.48	12.659
0.50	12.209
0.55	11.188
0.60	10.309
0.65	9.561
0.70	8.930
0.80	7.955
0.90	7.259
1.00	6.738
1.10	6.318
1.20	5.950
1.30	5.601
1.40	5.270
1.50	4.939
1.60	4.611
1.70	4.295
1.80	3.989
1.90	3.697
2.00	3.424
2.50	2.366
3.00	1.763
3.50	1.441
4.00	1.258
5.00	1.033
6.00	0.853

Табл. 1. Gd

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Gd 64 f
0	64
0.005	63.96
0.01	63.912

Табл. 2. Gd

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Gd 64 f
0.16	55.321
0.17	54.637
0.18	53.953

0.015	63.849	0.19	53.270
0.02	63.733	0.20	52.588
0.025	63.588	0.22	51.227
0.03	63.414	0.24	49.878
0.04	62.99	0.25	49.209
0.05	62.504	0.26	48.546
0.07	61.287	0.28	47.240
0.09	59.967	0.30	45.965
0.1	59.284	0.32	44.729
0.125	57.577	0.34	43.533
0.15	55.842	0.35	42.951
0.175	54.151	0.36	42.380
0.2	52.446	0.38	41.272
0.25	49.026	0.40	40.207
0.3	45.768	0.42	39.184
0.4	40.004	0.44	38.203
0.5	35.31	0.45	37.726
0.6	31.346	0.46	37.259
0.7	27.912	0.48	36.352
0.8	24.977	0.50	35.479
0.9	22.54	0.55	33.428
1	20.562	0.60	31.543
1.25	17.119	0.65	29.802
1.5	14.892	0.70	28.192
2	11.206	0.80	25.335
2.5	8.176	0.90	22.940
3	6.6695	1.00	20.970
3.5	5.163	1.10	19.372
4	4.6266	1.20	18.072
5	3.5538	1.30	16.995
6	2.7074	1.40	16.072
7	2.0603	1.50	15.247
8	1.7747	1.60	14.477
10	1.2034	1.70	13.741
15	0.87858	1.80	13.022
20	0.56345	1.90	12.317
50	0.06045	2.00	11.631
80	0.01468	2.50	8.683
100	0.00737	3.00	6.588
1000	7.7932E-6	3.50	5.490
1000000	3.5437E-14	4.00	4.830
1E9	1.7536E-22	5.00	3.905
		6.00	3.070

Табл. 1. Dy

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Dy 66 f
0	66
0.005	65.966
0.01	65.919
0.015	65.854
0.02	65.742
0.025	65.602
0.03	65.434
0.04	65.028
0.05	64.562
0.07	63.416
0.09	62.18
0.1	61.538
0.125	59.939
0.15	58.29
0.175	56.635
0.2	54.938
0.25	51.458
0.3	48.079
0.4	42.011
0.5	37.007
0.6	32.779
0.7	29.124
0.8	25.999
0.9	23.396
1	21.277
1.25	17.595
1.5	15.296
2	11.686
2.5	8.6356
3	6.9987
3.5	5.3619
4	4.8073
5	3.698
6	2.8583
7	2.1867
8	1.8746

Табл. 2. Dy

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Dy 66 f
0.16	57.771
0.17	57.101
0.18	56.425
0.19	55.744
0.20	55.059
0.22	53.681
0.24	52.300
0.25	51.611
0.26	50.926
0.28	49.570
0.30	48.240
0.32	46.944
0.34	45.686
0.35	45.073
0.36	44.471
0.38	43.299
0.40	42.171
0.42	41.086
0.44	40.042
0.45	39.536
0.46	39.039
0.48	38.073
0.50	37.143
0.55	34.958
0.60	32.953
0.65	31.103
0.70	29.394
0.80	26.366
0.90	23.821
1.00	21.721
1.10	20.011
1.20	18.623
1.30	17.483
1.40	16.522
1.50	15.680
1.60	14.913

10	1.2503
15	0.92106
20	0.60211
50	0.06849
80	0.01699
100	0.0086
1000	9.6554E-6
1000000	4.9144E-14
1E9	2.711E-22

1.70	14.190
1.80	13.491
1.90	12.808
2.00	12.141
2.50	9.267
3.00	6.963
3.50	5.720
4.00	5.000
5.00	4.075
6.00	3.270

Табл. 1. Nb

Элемент Z ($\sin[\theta/2]/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Nb 41 f
0	41
0.005	40.985
0.01	40.951
0.015	40.899
0.02	40.821
0.025	40.722
0.03	40.604
0.04	40.312
0.05	39.96
0.07	39.095
0.09	38.104
0.1	37.578
0.125	36.238
0.15	34.887
0.175	33.557
0.2	32.266
0.25	29.815
0.3	27.604
0.4	23.98
0.5	21.242
0.6	19.072
0.7	17.187
0.8	15.442
0.9	13.811
1	12.313

Табл. 2. Nb

Элемент Z ($\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$)	Nb 41 f
0.16	34.382
0.17	33.854
0.18	33.331
0.19	32.814
0.20	32.305
0.22	31.310
0.24	30.348
0.25	29.881
0.26	29.424
0.28	28.538
0.30	27.692
0.32	26.888
0.34	26.126
0.35	25.760
0.36	25.404
0.38	24.721
0.40	24.077
0.42	23.468
0.44	22.892
0.45	22.615
0.46	22.346
0.48	21.829
0.50	21.336
0.55	20.195
0.60	19.156

1.25	9.3098
1.5	7.4077
2	5.5763
2.5	4.5937
3	3.77
3.5	2.9463
4	2.5001
5	1.6078
6	1.2728
7	1.0953
8	0.9779
10	0.7431
15	0.35986
20	0.17586
50	0.00961
80	0.00188
100	8.661E-4
1000	4.8981E-7
1000000	7.9386E-16
1E9	1.4945E-24

0.65	18.187
0.70	17.268
0.80	15.533
0.90	13.915
1.00	12.427
1.10	11.098
1.20	9.945
1.30	8.972
1.40	8.169
1.50	7.516
1.60	6.969
1.70	6.564
1.80	6.216
1.90	5.927
2.00	5.680
2.50	4.710
3.00	3.860
3.50	3.065
4.00	2.405
5.00	1.690
6.00	1.327

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
Обобщенные контрольные вопросы	4
Лабораторная работа №1. «Определение радиуса первой координационной сферы в структуре металлических стекол»	6
Теоретическая часть.....	6
Порядок выполнения работы	11
Контрольные вопросы	12
Лабораторная работа №2. «Определение размеров областей когерентного рассеяния в структуре металлических стекол»	13
Теоретическая часть.....	13
Порядок выполнения работы	17
Контрольные вопросы	17
Лабораторная работа №3. «Анализ углового распределения интенсивности рассеянного рентгеновского излучения металлическими стеклами»	18
Теоретическая часть.....	18
Порядок выполнения работы	23
Контрольные вопросы	23
Список литературы	25
Приложение №1. Дифрактограммы металлических стекол	29
Приложение №2. Экспериментальные данные интенсивности рассеяния рентгеновских лучей	49
Приложение №3. Атомные факторы элементов.....	85

Учебное издание

МАКАРОВ Андрей Сергеевич, КРЕТОВА Марина Александровна,
КОНЧАКОВ Роман Анатольевич, ХОНИК Виталий Александрович

ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ ПО РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОМУ АНАЛИЗУ

Часть 2

*Учебно-методическое пособие по дисциплине
«Физика конденсированного состояния» для студентов бакалавриата
физико-математического факультета, обучающихся по направлению
44.03.05 «Педагогическое образование», профили: «Естествознание / Физика»,
«Физика / Информатика»*

В авторской редакции
Подписано в печать 13.04.2018. Формат 60 х 84/16. Печать трафаретная.
Гарнитура «Таймс». Усл.-печ. л. 6,75. Уч.-изд. л. 6,27.
Тираж 26 экз. Заказ 59.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Воронежский государственный педагогический университет».
Отпечатано с готового оригинала-макета
в издательско-полиграфическом центре ВГПУ.
394043, г. Воронеж, ул. Ленина, 86. Тел. (473) 255-58-32; 255-61-83.