

Надатомные структуры в наноматериалах

(М.В.Авдеев)

(магистры 2 год, 5 курс, весна 2018-19)

Тема 1. ВВЕДЕНИЕ

Малоугловое рентгеновское и нейтронное рассеяние как дифракционные методы исследования вещества. Понятие дифракционной картины и кривой рассеяния. Исходные формулы для описания волновой картины рассеяния. Основные приближения, используемые в малоугловом рассеянии.

Тема 2. БАЗОВЫЙ ФОРМАЛИЗМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ

Исходные формулы для описания волновой картины рассеяния, принцип суперпозиции амплитуд. Разность хода, фазовый сдвиг, вектор рассеяния, амплитуда рассеяния от составного объекта. Связь картины рассеяния с размерами рассеивающего объекта.

Тема 3. ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ ВОССТАНОВЛЕНИЯ СТРУКТУРЫ

Базовые принципы расшифровки структур по данным малоуглового рассеяния. Этапы моделирования структуры. Принцип суперпозиции амплитуд и моделирование надатомных структур.

Тема 4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ АСПЕКТЫ

Принципиальная схема установки малоуглового рассеяния, ее отличия от устройства дифрактометров, предназначенных для исследования кристаллических объектов. Обзор источников синхротронного излучения и нейтронов.

Тема 5. КОНСТРУКЦИЯ МАЛОУГЛОВЫХ ДИФРАКТОМЕТРОВ

Рассмотрение конструкции и принципов функционирования основных узлов рентгеновских и нейтронных малоугловых станций. Типы объектов, изучаемых методом малоуглового рассеяния.

Тема 6. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ ДИФРАКЦИОННОГО АНАЛИЗА

Нарушения периодичности структуры и их влияние на картину дифракции. Монодисперсные и полидисперсные системы частиц. Основные формулы анализа малоуглового рассеяния. Интенсивность рассеяния и корреляционные функции.

Тема 7. КОНТРАСТ

Понятие контраста в эксперименте по малоугловому рассеянию. Принцип Бабины. Вариация контраста. Точка компенсации.

Тема 8. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ В ПРЯМОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Характеристическая корреляционная функция. Функция распределения по парным расстояниям для однородных частиц. Подходы и программы расчета функции распределения по парным расстояниям. Сравнение алгоритмов расчета. Устойчивость решения.

Тема 9. ИНВАРИАНТЫ РАССЕЯНИЯ

Структурные параметры, определяемые из кривой малоуглового рассеяния. Инварианты. Корреляционная длина и максимальный размер частицы. Методы расчета геометрических и весовых параметров частиц. График Гинье. Закон Порода. Инвариант Порода.

Тема 10. АБСОЛЮТНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ

Определение молекулярной массы частиц, техника проведения абсолютных измерений в малоугловом эксперименте. Влияние неоднородностей плотности частиц на кривую рассеяния. Рассеяние от тел простой геометрической формы.

Тема 11. МОНОДИСПЕРСНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ

Методы определения структуры частиц в монодисперсных системах. Задача восстановления трехмерной функции плотности длины рассеяния по одномерной кривой малоуглового рассеяния.

Тема 12. СЛОЖНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ

Методы моделирования структуры. Математические основы моделирования структуры частиц.

Основная литература

1. Д. И. Свергун, Л. А. Фейгин. "Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние". Москва, "Наука", 1986, 279с.
2. А.Ф. Скрышевский. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел. М., Высшая школа, 1980, 328с.
3. O. Glatter, O. Kratky. "Small-Angle X-ray Scattering". Academic Press Inc. (London) Ltd, 1982, 515p.
4. A. Guinier and G. Fournet. "Small-Angle Scattering of X-Rays". John Wiley & Sons, Inc. (New York), Charman & Hall, Ltd. (London), 1955, 268p.
5. В.И. Иверонова, Г.П. Ревкевич, Теория рассеяния рентгеновских лучей. М.: МГУ, 1978.

Дополнительная литература

1. Б. К. Вайнштейн. Дифракция рентгеновских лучей на цепных молекулах. Москва, Издательство академии наук СССР, 1963г., 372с.
2. Ю. С. Липатов, В. В. Шилов, Ю. П. Гомза, Н. Е. Кругляк. "Рентгенографические методы изучения полимерных систем". "Наукова Думка", Изд. хим. лит., 1982 г., 296с.
3. А.Гинье. "Рентгенография кристаллов". Москва, Гос. изд. физ.-мат. лит., 1961 г., 604с. Пер. с А.Guinier. "Theorie et Technique de la Radiocristallographie". 2e edition, Paris, DUNOD, 1956.
4. В.И.Иверонова, Г.П.Ревкевич. Теория рассеяния рентгеновских лучей. Издательство Московского университета, 1972, 252с.
5. Дж. Каули. "Физика дифракции". Москва, "Мир", 1979, 432 с.
6. Фетисов Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. М.: Физматлит, 2007.