

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ

Факультет физики

## Лабораторная работа

«Рентгеновская дифрактометрия»

Работу выполнил студент 3 курса  
Захаров Сергей Дмитриевич



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

Москва  
2020

Для анализа были предоставлены данные, представленные на рисунке 1. Вместе ними нам дается знание, что они были получены на излучении  $\text{CuK}-\alpha_1$ , а в веществе должны присутствовать O, La, Sr, Mn.

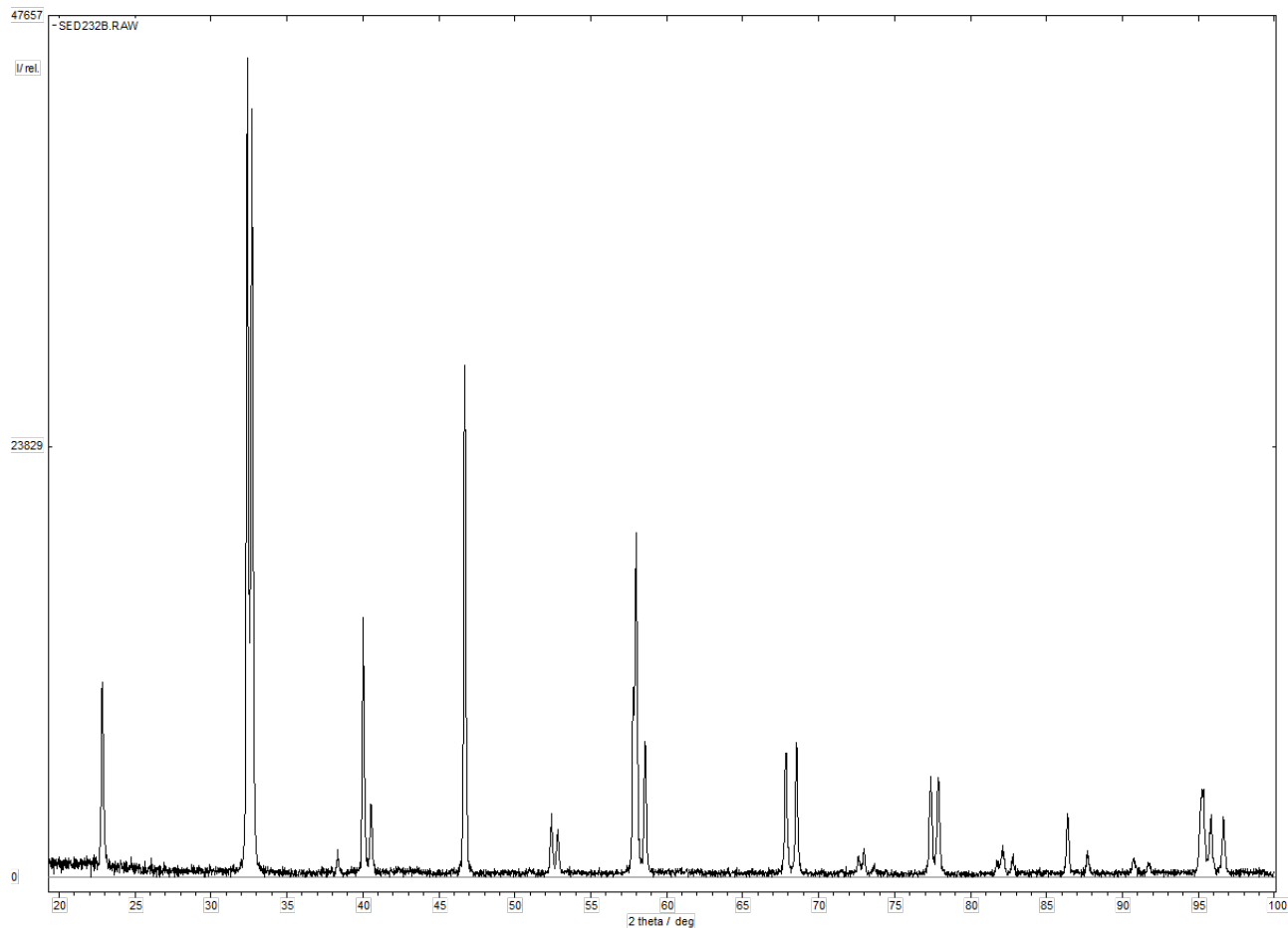


Рис. 1. Предоставленные для анализа данные

На основании этого, с помощью программы Match! и встроенной в нее базы данных попытаемся найти в последней что-то, похожее на имеющиеся у нас данные. Для этого сперва исключим все записи, не имеющие указанных элементов, после чего последовательно начнем просматривать оставшиеся.

В результате некоторого поиска было обнаружено, что наилучшее совпадение (даже без подгонки) обеспечивает формула  $\text{La}_{0.67} \text{Sr}_{0.33} \text{MnO}_3$  (запись 96-153-3313). Промежуточные данные представлены на рисунке 2.

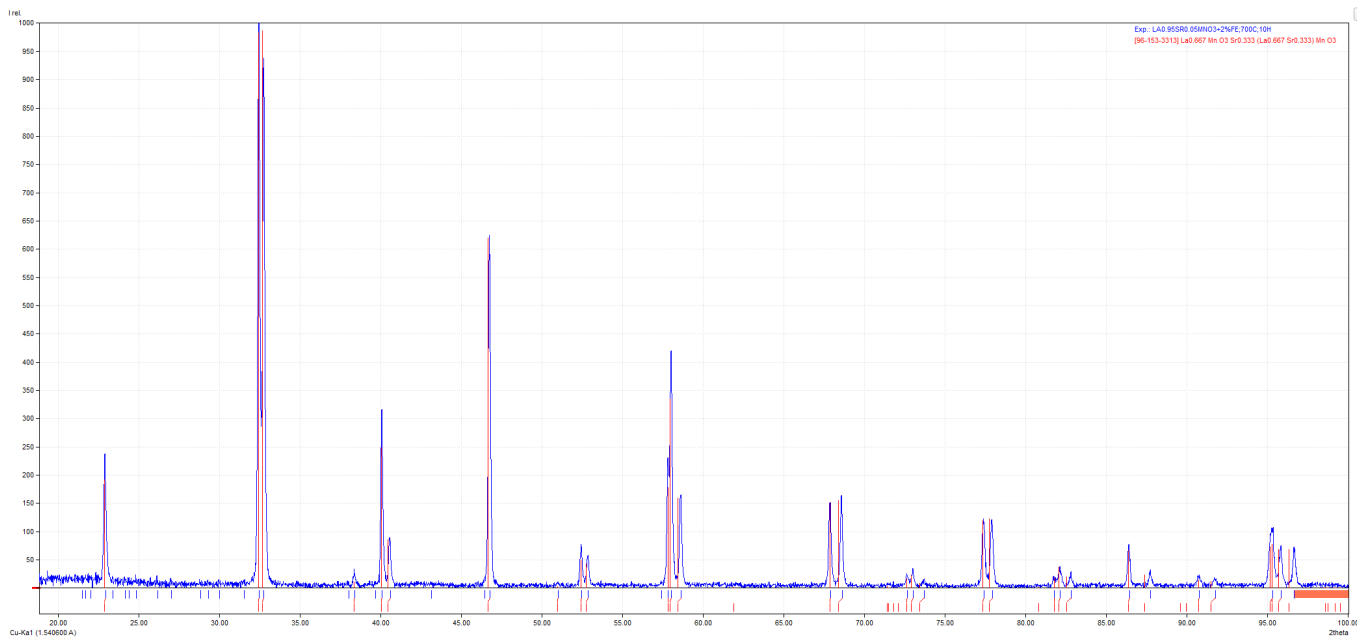


Рис. 2. Результат поиска совпадений в программе Match!

Теперь, зная из карточки из записи необходимые параметры (а именно формулу, параметры решетки и положение атомов), а также тип излучения, мы можем с помощью программы PowderCell фитануть полученные графики. По результатам была получена картина, представленная на рисунке 3. Сравнительно небольшие  $R$  ( $R_p = 20.38$ ,  $R_{wp} = 50.61$ ,  $R_{exp} = 0.68$ ) свидетельствуют о том, что процесс фита в целом прошел успешно, что в очередной раз подтверждает правильность выбранной нами формулы  $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$ .



---

## Список литературы

- [1] Рентгendifракционные методы изучения структуры монокристаллов, поликристаллических и аморфных материалов