

III Национална школа „Увод в праховата рентгенова дифракция“

20-24 март 2023 г.

залата на ИОМТ-БАН

Лектори:

доц. д-р Цвета Станимирова СУ“Св. Климент Охридски“

проф. д-р Даниела Ковачева ИОНХ-БАН

проф. д-р Томас Керестеджиян ГИ-БАН

доц. д-р. Петър Цветков ИОНХ-БАН

проф. д-р Владислав Костов-Китин ИМК-БАН

гл.ас. д-р Стефка Денчева

ас. Иванина Сергеева

Програма

9–13 часа-лекции

13–14 часа-почивка

14–18 часа-упражнения

1 ден (20 март)

9–13 ч.: 4 ч. Лекции

Тема: Материалът-Кристално и аморфно състояние на твърдите тела, кристална решетка, симетрии, симетрични операции и елементи на симетрия, точкови групи, пространствени групи.

13–14 ч.-почивка

14–18 ч.: 4 ч. Упражнения

Тема: Симетрични операции и елементи на симетрия. Визуализиране на кристални структури.

2 ден (21 март)

9–13 ч.: 4 часа Лекции

Тема: Равнини в кристална решетка. Милерови индекси. Природа на рентгеновите лъчи, рентгенова тръба, устройство на рентгенов дифрактометър, Взаимодействие на рентгенови лъчи с веществото – разсейване, поглъщане, дифракция, Извод на уравнението на Брег, Прахова рентгенограма-позиции, интензитет на пиковите, фон

13–14 ч.-почивка

14–18 часа 4 ч. Упражнения

Тема: Качествен фазов анализ

Идентификация на кристални фази с ръчни определители

Идентификация на кристални фази с програми Match и QualX и база данни Crystallographic Open Database

3 ден (22 март)

9–13 часа: 4 ч. Лекции

Тема: Интензитет на дифракционните линии

Интензитет на дифракционните линии, структурен фактор, систематични погасявания, индексирание, определяне на пространствени групи на симетрия, преимуществена ориентация.

13–14 ч.-почивка

14–18 часа 4 ч. Упражнения

Тема: Индексирание на прахови дифракционни картини

Ръчно индексирание на прахова дифрактограма и определяне на група на кубични вещества

Индексирание на прахова дифрактограма с пакет FullProf

4 ден (23 март)

9–13 часа: 4 ч. Лекции

Тема: Количествен фазов анализ по данни от прахова дифракция -2часа

Тема: Анализ на ширината на дифракционната линия - ефекти на размери и микронапрежения-2часа

13–14 ч.-почивка

14–18 часа 4 ч. Упражнения

Тема: Количествен анализ с програмите Match и QualX.

Тема: Анализ на ширина на дифракционната линия с програмите PowderCell и WinPlotr.

5 ден (24 март)

9–13 ч.: 4 ч. Лекции

Тема: Някои фактори за грешки и неточности при праховата рентгенова дифракция. Пробоподготовка. Текстура.

-Апаратни ефекти, позиция на пробата, дебелина, грапавост, асиметрия, особености на пробите(хигроскопичност, взаимодействие с въздух и др.)

- Специфични обекти със структурни особености и др.

13–14 ч.-почивка

14–18 часа 4 ч. Упражнения

Практически упражнения с посещение на наличните дифрактометри (ИОНХ, ИМК, СУ-ГГФ)

Въпроси и отговори

Изпит за докторанти.