

ОГЛАВЛЕНИЕ

От редактора	7
Предисловие	9
Сокращения	10
Введение	14
Глава 1. Кое-что о рентгеноструктурном анализе, электромагнитном излучении, рентгеновских лучах, их свойствах и дифракции	17
1.1. Электромагнитное излучение и рентгеновские лучи	17
1.2. Свойства излучения рентгеновской трубки	20
1.3. Математическое описание бегущих волн (волновое уравнение)	27
1.3.1. Параметры волнового уравнения (29). 1.3.2. Поляризация плоской волны (31).	
1.4. Волновые свойства рентгеновских лучей	33
1.4.1. Преломление и зеркальное отражение рентгеновских лучей (33).	
1.5. Корпускулярные свойства рентгеновских лучей	35
1.5.1. Упругое и неупругое рассеяние (35). 1.5.2. Коэффициент поглощения рентгеновских лучей (47).	
1.6. О дифракции света, как «родственника» рентгеновских лучей	55
1.7. Принципы рентгеновской кристаллографии	58
1.7.1. Дифракция рентгеновских лучей на кристаллах: геометрические принципы (59). 1.7.2. Кристаллическое пространство, решетка дифракционного изображения и обратная решетка (63). 1.7.3. Графическая модель Эвальда (70).	
1.8. Интенсивность рассеяния рентгеновских лучей кристаллами — атомная структура	73
1.8.1. Рассеяние свободным электроном (74). 1.8.2. Рассеяние атомом и атомный фактор (78). 1.8.3. Рассеяние рентгеновских лучей кристаллом (82).	
1.9. Рентгеноструктурный анализ и фазы структурных факторов	87
1.9.1. Метод проб и ошибок (88). 1.9.2. Метод функций Паттерсона (89). 1.9.3. Прямые методы (построение разностных карт Фурье) (89).	
Глава 2. Что такое синхротронное излучение?	91
2.1. Синхротронное излучение: его свойства и получение	93
2.2. Принципиальное устройство синхротрона	97
2.3. Основные параметры для характеристики источников СИ	104
2.3.1. Критическая энергия спектра синхротронного излучения (104). 2.3.2. Характеристики интенсивности фотонного излучения (107).	
2.4. Паразитическое СИ — источники 1-го поколения	109
2.5. Накопительные кольца — источники СИ 2-го поколения	111
2.6. Свойства СИ из поворотных магнитов	113
2.6.1. Поляризация синхротронного излучения (114). 2.6.2. Временная структура СИ (116). 2.6.3. Эмйттанс электронного пучка и размеры источника излучения (116).	

2.7. Вставные магнитные устройства для генерирования СИ	117
2.7.1. Ондулятор (119). 2.7.2. Свойства ондуляторного излучения (121). 2.7.3. Вигглер (128). 2.7.4. Естественные ондуляторы (131).	
2.8. Источники СИ 3-го поколения	150
2.9. Новые источники СИ — источники СИ 4-го поколения	153
2.9.1. Рентгеновские лазеры на свободных электронах (154). 2.9.2. Источники СИ на базе линейных ускорителей (ЛУР) (163). 2.9.3. Комптоновские источники импульсного рентгеновского излучения (170). 2.9.4. Другие примеры компактных источников синхротронного излучения (189).	
2.10. Действующие и строящиеся источники СИ и области их применения	193
Глава 3. Оборудование каналов СИ и экспериментальные станции	203
3.1. Каналы вывода пучков СИ	203
3.2. Средства контроля и диагностики пучков СИ	205
3.2.1. Детекторы рентгеновского излучения (206). 3.2.2. Координатные детекто- ры (236). 3.2.3. Телевизионные детекторы (250). 3.2.4. Координатные детекторы на рип-диодных матрицах (255). 3.2.5. IP-детекторы — детекторы на пластинах с оптической памятью (258). 3.2.6. Учет мертвого времени детектора в эксперимен- тах на СИ (262).	
3.3. Устройства для управления пучками СИ	267
3.3.1. Заслонки и коллиматоры (268). 3.3.2. Мониторы пучков рентгеновских лучей (270). 3.3.3. Монохроматоры и кристалл-спектрометры — дифракционная оптика (282). 3.3.4. Рентгеновские зеркала (296). 3.3.5. Другие перспективные элементы рентгеновской оптики (317).	
3.4. Транспортировка пучков СИ	324
3.5. Отбор и монохроматизация СИ для экспериментов	326
3.5.1. Решение проблемы высших гармоник (333).	
3.6. Экспериментальные станции	334
Глава 4. Рентгеноструктурный анализ на СИ	338
4.1. Суть рентгеноструктурного анализа	340
4.1.1. Экспериментальная база для РСА (342). 4.1.2. Особенности дифракцион- ных измерений при работе на СИ (342).	
4.2. Дифрактометрия монокристаллов на монохроматическом излучении	346
4.2.1. Рентгеновские дифрактометры (349). 4.2.2. Интегральная интенсивность брэгговского отражения (355).	
4.3. Применения СИ в рентгеноструктурном анализе монокристаллов.	360
4.3.1. Рентгеноструктурный анализ с разрешением по времени (360). 4.3.2. Струк- турные исследования с использованием аномальной дифракции (376). 4.3.3. Мно- говолновая аномальная дифракция (МАД) (391). 4.3.4. Анизотропия аномального рассеяния и использование поляризации СИ (398). 4.3.5. Экспериментальные станции для аномальной дифракции на СИ (402). 4.3.6. Метод Лауэ — дифрак- тометрия монокристаллов на полихроматическом излучении (412). 4.3.7. Дифрак- тометрия микрообразцов и микродифракция (450).	
4.4. Дифрактометрия порошков	456
4.4.1. Основная идея рентгеновской кристаллографии порошков (456). 4.4.2. Экс- периментальные методы порошкового рентгеноструктурного анализа (461). 4.4.3. Применение СИ для расшифровки новых структур по дифрактограммам порошков (473). 4.4.4. Энергодисперсионная дифрактометрия (479).	
Глава 5. XAFS спектроскопия для структурного анализа	488
5.1. Принципы XAFS спектроскопии	491

5.1.1. Измерение коэффициента поглощения (493).	
5.2. Флуктуации спектра поглощения и нормализованная функция XAFS	495
5.3. Причины возникновения XAFS и основы теории	497
5.3.1. Модель дифракции электронных волн (498). 5.3.2. Модель рассеяния медленных электронов (500). 5.3.3. Основные формулы EXAFS спектроскопии (504). 5.3.4. Функция EXAFS в случае однократного рассеяния (506).	
5.4. Методы измерения XAFS	508
5.4.1. Рентгеновское излучение для измерения XAFS (510). 5.4.2. Системы измерения интенсивности (512). 5.4.3. Образцы для исследования методами XAFS (513).	
5.5. Схемы измерения в XAFS спектроскопии.	515
5.5.1. Метод прямого измерения ослабления интенсивности (съемка «напрямую») (516). 5.5.2. Косвенные методы измерения (520).	
5.6. Измерение EXAFS в особых и экстремальных условиях	526
5.7. Планирование и проведение экспериментов	527
5.7.1. Скорость измерений (529).	
5.8. Первичная обработка экспериментальных данных	530
5.9. Получение структурных данных из спектров EXAFS	534
5.10. Предварительный анализ экспериментальных данных	535
5.10.1. Фурье-фильтрация (536).	
5.11. Определение структурных параметров.	541
5.11.1. Метод наименьших квадратов (541). 5.11.2. Использование эталонов при структурном анализе (544). 5.11.3. Структурный анализ с теоретическим расчетом амплитуд и фаз рассеяния (546).	
5.12. Околопороговая тонкая структура спектра поглощения.	549
5.12.1. Спектроскопия XANES (550). 5.12.2. Спектроскопия NEXAFS (553).	
5.13. Тонкая структура аномальной дифракции рентгеновских лучей (DAFS)	557
5.14. Применения спектроскопии XAFS.	562
5.14.1. Исследование аморфных веществ и жидкостей (562). 5.14.2. Исследование структуры расплавов (567). 5.14.3. Исследование оксидных систем и катализаторов (568). 5.14.4. Проблемы охраны окружающей среды (569). 5.14.5. XAFS спектроскопия с разрешением по времени (570). 5.14.6. Примеры исследований методом XAFS в экстремальных условиях (573).	
5.15. Примеры применения метода DAFS.	573
5.15.1. Исследование смесей аморфной и кристаллической фаз (573). 5.15.2. Применение DAFS для исследования локального порядка в ВТСП (574).	
5.16. Компьютерные программы для анализа XAFS.	575
5.17. Центры развития и применения метода спектроскопии XAFS	578
Глава 6. Некоторые полезные формулы, таблицы и графики	580
6.1. Введение	580
6.2. Единицы измерения физических величин.	581
6.3. График преобразования λ [Å]– ϵ [кэВ] для фотонов	583
6.4. Основные физические константы	583
6.5. Прохождение быстрых электронов через вещество.	585
6.5.1. Радиационная длина релятивистских электронов (585).	
6.6. Прохождение рентгеновских фотонов через вещество.	590
6.6.1. Таблицы и базы данных рентгеновских свойств материалов (590). 6.6.2. Атомный фактор (591). 6.6.3. Сечение взаимодействия рентгеновских фотонов с веществом и коэффициенты поглощения (591). 6.6.4. Коэффициенты	

поглощения для некоторых химических элементов (596). 6.6.5. Показатель преломления (611). 6.6.6. Длина поглощения рентгеновских лучей и ее связь с показателем преломления и атомным фактором рассеяния (612).	
6.7. Энергетические характеристики пучков и импульсов рентгеновского излучения	613
6.8. Формулы связи между рассеянием, преломлением и отражением рентгеновских лучей	614
6.9. Формулы для зеркал полного внешнего отражения	615
6.10. Многослойные зеркала — монохроматоры на основе МТПС	616
6.11. Формулы для монокристалльных монохроматоров	617
6.12. Действующие и строящиеся источники СИ рентгеновского диапазона	618
Список литературы	636
Предметный указатель	664