

Полная исследовательская публикация Тематический раздел: Физико-химические исследования.
Идентификатор ссылки на объект – ROI: jbc-01/17-51-7-86 Подраздел: Кристаллография.
Цифровой идентификатор объекта – <https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/17-51-7-86>
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 548.73. Поступила в редакцию 26 июля 2017 г.

Методика расчёта кристаллографических характеристик цейлонского графита методом рентгеновской дифракции

© Попова Анна Николаевна

Федеральный исследовательский центр угля и углехимии СО РАН,
пр-т. Советский, 18. г. Кемерово, 650000. Россия. E-mail: h991@yandex.ru

Ключевые слова: метод рентгеноструктурного анализа, кристаллическая структура, графит.

Аннотация

Методы рентгенографии, в целом, относятся к наиболее распространённым, более того неразрушающим, методам, характеризующим структуру вещества, в том числе углеродных материалов и композитов на их основе. Рентгеновская дифракция используется для исследования фазового состава образцов, для проведения качественного и количественного состава определённых фаз, для оценки кристаллографических структурных характеристик исследуемых углеродных материалов. В статье описана методика расчёта основных структурных характеристик графита. К основным характеристикам кристаллической структуры образцов относятся межплоскостное расстояние (d_{001}), размеры структурных составляющих (L_a и L_c), а также степень упорядочения. Для описания неоднородности фазового состава образцов проводится сопоставление полученных данных от основных кристаллографических рефлексов серии (001), которая соответствует основной плоскости графита. Показано, что рефлексы (002), (004) и (006) являются суперпозицией компонент, характеризующих отдельные структурные фазы исследуемых образцов с соответствующими межплоскостными расстояниями. Разложение рефлексов на структурные компоненты позволяет ввести дополнительную характеристику образца – соотношение фаз, которая дает возможность лучше охарактеризовать кристаллическую структуру образцов, при близости их суммарных (без учёта разложения) структурных характеристик.