

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas, Institutas	Katedra, Skyrius
Kristalinių ir magnetinių struktūrų nustatymas	Chemija 03P	Chemijos ir geomokslų fakultetas	Neorganinės chemijos katedra
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
paskaitos		konsultacijos	3
individualus	5	seminarai	

Dalyko anotacija

Kurso tikslas perteikti teorinius ir praktinius medžiagų kristalinės ir magnetinės struktūros nustatymo metodus iš rentgeno spindulių (XRD) bei neutronų difrakcijos duomenų.

Kurse nagrinėjamos temos: kristalinės medžiagos; magnetinės medžiagos; kristalografijos pagrindai; rentgeno spindulių generavimas; neutronų srauto generavimas; rentgeno spindulių ir neutronų srauto ypatumai bei taikymo galimybės; difraktogramos anatomija; kristalinės struktūros nustatymas difrakciniu metodu: Le Bail tikslinimo metodas ir Rietveld analizė; mėginių paruošimas; duomenų užrašymo sąlygos; magnetinių savybių nustatymas; granato struktūros junginių kristalinės struktūros nustatymas Le Bail tikslinimo bei Rietveld metodais analizuojant XRD duomenis; granato struktūros junginių kristalinės ir magnetinės struktūros nustatymas Rietveld metodu analizuojant neutronų difrakcijos duomenis; kristalinės struktūros vizualizavimas; magnetinės struktūros vizualizavimas; instrumentinis failas; kristalitų dydžio nustatymas; ryšių ilgiai ir kampai.

Studento pasirinktų bent 3 junginių kristalinės struktūros nustatymas Le Bail ir Rietveld metodais.

Pagrindinė literatūra

Furrer A., Mesot J., Strassle T., Neutron Scattering in Condensed Matter Physics, World Scientific, Switzerland, 2009

Rodrigues-Carvajal J., An Introduction to the Program FullProf 2000

Pynn R., Neutron Scattering – A primer, LANSCE, 1990

Stahl K., Powder Diffraction and the Rietveld method, Lyngby, 2008

Will G., Powder Diffraction: The Rietveld Method and the Two-Stage Method, Springer, 2006

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	mokslo laipsnis	pedag. vardas	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Ramūnas Skaudžius	Dr.	Doc.	<ol style="list-style-type: none"> 1. R. Skaudžius, D. Enseling, M. Skapas, A. Selskis, E. Pomjakushina, T. Jüstel, A. Kareiva, C. Rüegg. <i>Opt. Mat.</i>, 60 (2016) 467-473. 2. M. Skruodiene, M. Misevicius, M. Sakalauskaite, A. Katelnikovas, R. Skaudžius. <i>J. Lumin.</i> 179 (2016) 355-360. 3. R. Skaudžius, T. Juestel, A. Kareiva. <i>Mater. Chem. Phys.</i>, 170 (2016) 229-238. 4. J. Trinkuniate-Felsen, A. Prichodko, M. Semasko, R. Skaudžius, A. Beganskiene, A. Kareiva. <i>Adv. Powder Technol.</i>, 26 (2015) 1287-1293. 5. S. Butkute, A. Zabiliute, R. Skaudžius, P. Vitta, A. Beganskiene, A. Zukauskas, A. Kareiva. <i>Sol-Gel Sci. Technol.</i>, 76 (2015) 210-219. 6. R. Skaudžius, A. Katelnikovas, D. Enseling, A. Kareiva, T. Juestel. <i>J. Lumin.</i>, 147 (2014) 290-294

Patvirtinta Chemijos m. krypties Doktorantūros komitete 2017 m. rugsėjo 21 d., protokolo Nr. 610000-DP-44.

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Aivaras Kareiva.