

Kondenzált anyagok fizikája (5. gyakorlat)

Szükséges előismeretek: reciprokrács, Miller-indexek, rácscsíkok, a rugalmas szórás elmélete, atomszórási tényező, szerkezeti tényező, Bragg-tényező, pordiffrakció, Debye–Scherrer-gyűrűk;

Előző gyakorlatról maradt:

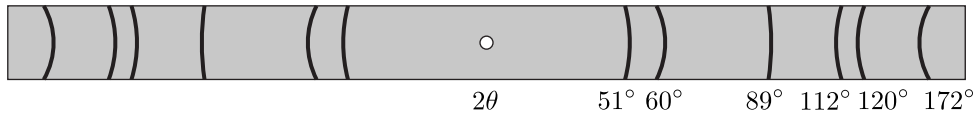
F0.1. Határozzuk meg az $f(\vec{\kappa})$ atomszórási tényező értékét a szóródó röntgensugárzás hullámszámvektorának $\vec{\kappa}$ megváltozása függvényében, ha a q töltésű elektronfelhőt r_0 sugarú, vékonyfalú gömbhéjnak tekintjük!

F0.2. Számítsuk ki, milyen irányokban láthatunk intenzitáscsúcsokat FCC kristályszerkezet röntgendiffrakciós vizsgálata esetén, kétféleképpen:

- a) az FCC primitív rácsvektorait választva bázisvektoroknak;
 - b) az FCC kocka alakú, konvencionális elemi cellájának oldaléleit választva bázisvektoroknak.
- Mutassuk meg, hogy a két módszer ugyanazt az eredményt adja.

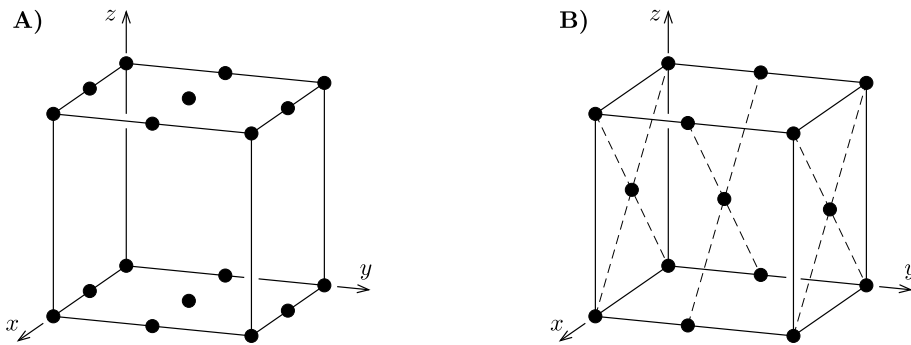
Új feladat:

F1. Az alábbi *ábra* az FCC kristályrácsú alumínium pordiffrakciós képét mutatja. Az egyes Debye-Scherrer gyűrűk alatt a mért 2θ szögek vannak feltüntetve. A beeső röntgensugárzás hullámhossza $\lambda = 2,02 \text{ \AA}$ volt. A mérési adatok alapján számítsuk ki az alumínium a rácsparaméterét!



Gyakorló feladat:

Gy1. Egy bizonyos, csupa egyforma X atomból álló anyagnak kétféle kristályos változata létezik. A két kristályszerkezet egy-egy elemi cellája látható az *ábrán*. A rajzon szereplő mindkét elemi cella oldaléle a hosszúságú. A kristályszerkezeteket röntgentartományba eső, monokromatikus síkhullámmal sugározzuk be. Ebben a feladatban arra a kérdésre keressük a választ, hogy milyen lesz a kialakuló elhajlási kép szerkezete.



a) Határozzuk meg az X atomra vonatkozó atomszórási tényezőt a rajta szóródó röntgensugárzás hullámszámvektorának κ megváltozásának függvényében, ha az atom elektronfelhőjét q töltésű, r_0 sugarú, vékonyfalú gömbhéjnak tekintjük.

b) Hány atomból áll a bázis az **A)** és **B)** esetben? Adjuk meg a bázist alkotó atomok helyvektorait az ábrán látható koordináta-rendszerben.

c) A röntgendiffrakciós maximumok irányait a köbös celláknál szokásos h, k, ℓ indexekkel jellemezhetjük. Töltsük ki az alábbi táblázatot a következőképpen:

- Ha egy adott irányban tökéletes kioltás történik, a megfelelő mezőbe tegyünk X-et.
- Ha egy adott irányban reflexiós csúcsot tapasztalhatunk, a megfelelő mezőbe írjunk egy számot, amely megadja a diffrakciós maximum relatív intenzitását az adott kristályszerkezetenél tapasztalható legerősebb diffrakciós maximum intenzitásához képest.

N	hkl	A) rács	B) rács	N	hkl	A) rács	B) rács
1	100			8	220		
2	110			9	300, 221		
3	111			10	301		
4	200			11	311		
5	210			12	222		
6	211			13	320		
(7)	–			14	321		