

Dyfrakcja rentgenowska (XRD) w analizie fazowej

Plan na rok akademicki 2017/2018

1. Przypomnienie podstawowych wiadomości o budowie krystalicznej materii.
2. Odkrycie promieniowania X; teoria Lauego i Braggów-Wulfa.
3. Aparatura i parametry pomiarowe.
4. Możliwości modyfikacji współczesnej aparatury w metodzie XRD.
5. Przygotowanie pomiarów XRD i interpretacja wyników pomiarów XRD.
6. Od czego zależy intensywność refleksów na rentgenogramie? Reguły wygaszeń systematycznych.
7. Wskaźnikowanie rentgenogramów i wyznaczanie parametrów sieciowych. Gęstość rentgenowska.
8. Rentgenowska analiza fazowa jakościowa.
9. Rentgenowska analiza fazowa ilościowa.
10. Metoda Rietvelda.
11. Identyfikacja roztworów stałych na podstawie pomiarów XRD.
12. Synchrotron Solaris
13. Metody wykorzystujące promieniowanie X, inne niż XRD
14. – 15. Zastosowanie metody XRD - referaty studentów.

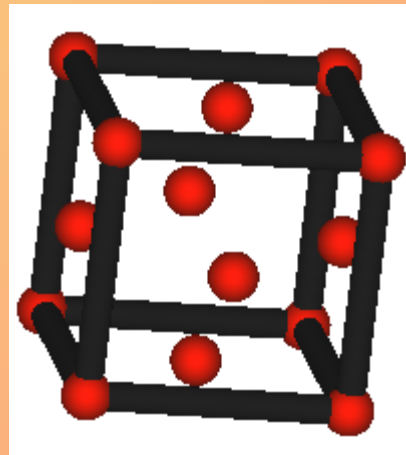
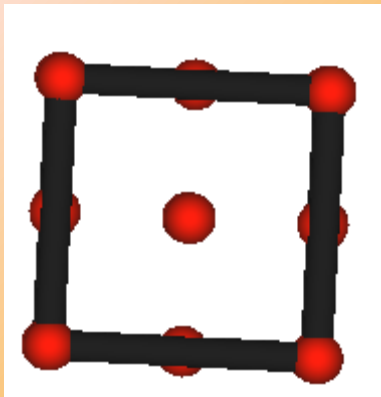
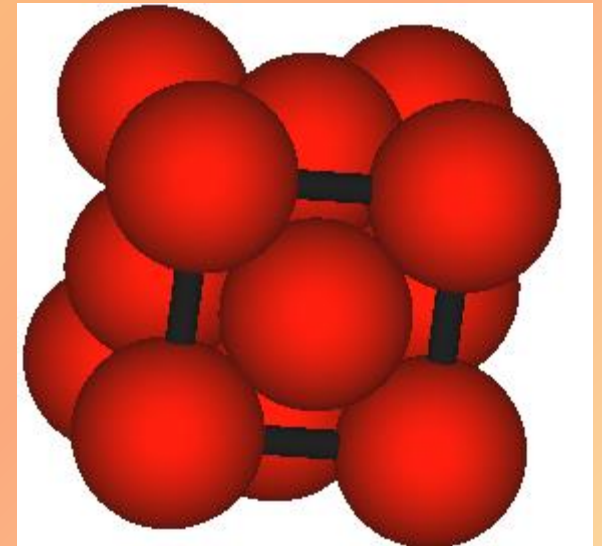
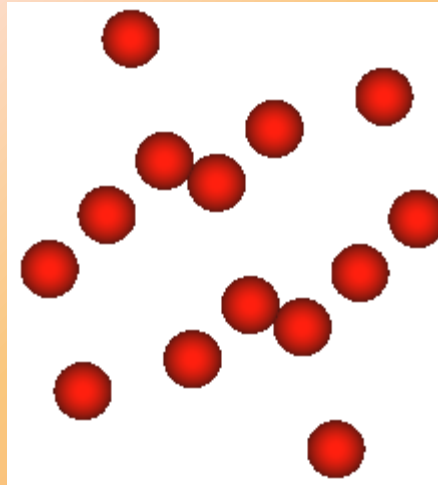
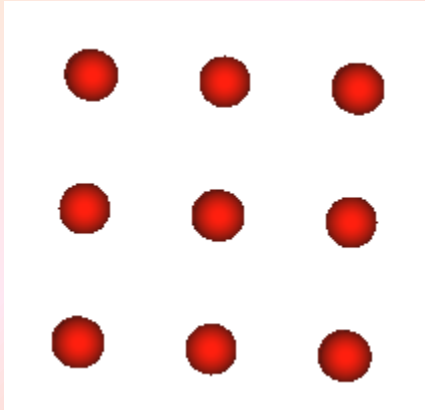
Strona internetowa przedmiotu:
<http://www.xrd.ceramika.agh.edu.pl>

Dyfrakcja rentgenowska (XRD) w analizie fazowej

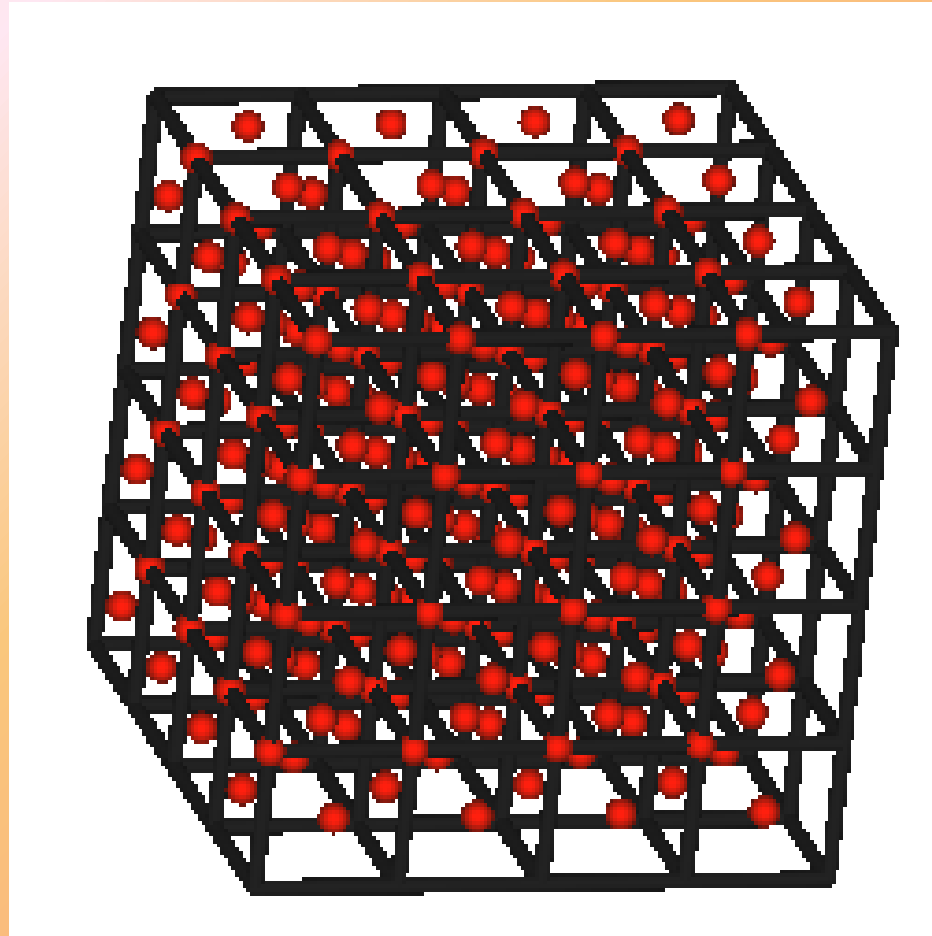
Wykład 1

1. Pojęcia: sieć krystaliczna – sieć przestrzenna, Komórka elementarna sieci krystalicznej i przestrzennej.
2. Węzły sieci krystalicznej a rozmieszczenie atomów / jonów w komórce zasadniczej.
3. Płaszczyzny i proste sieciowe, wskaźniki.
4. Pojęcie odległości międzyplaszczynowej.

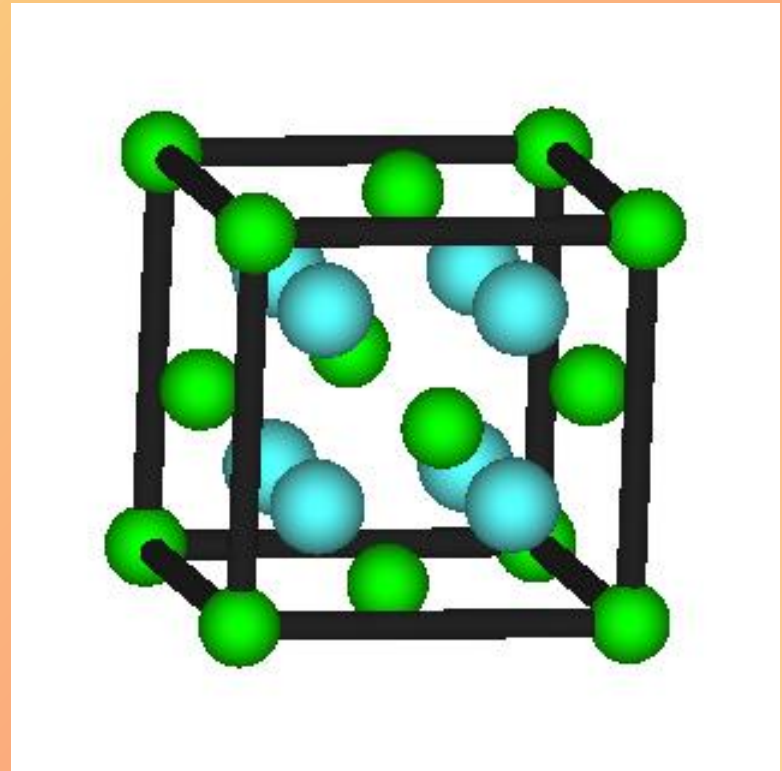
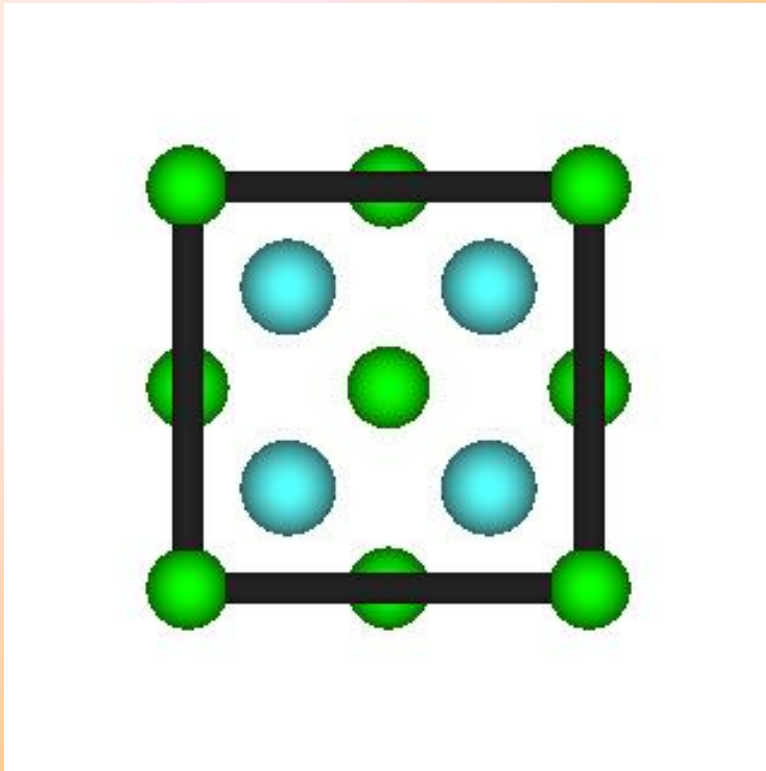
Struktury krystaliczne



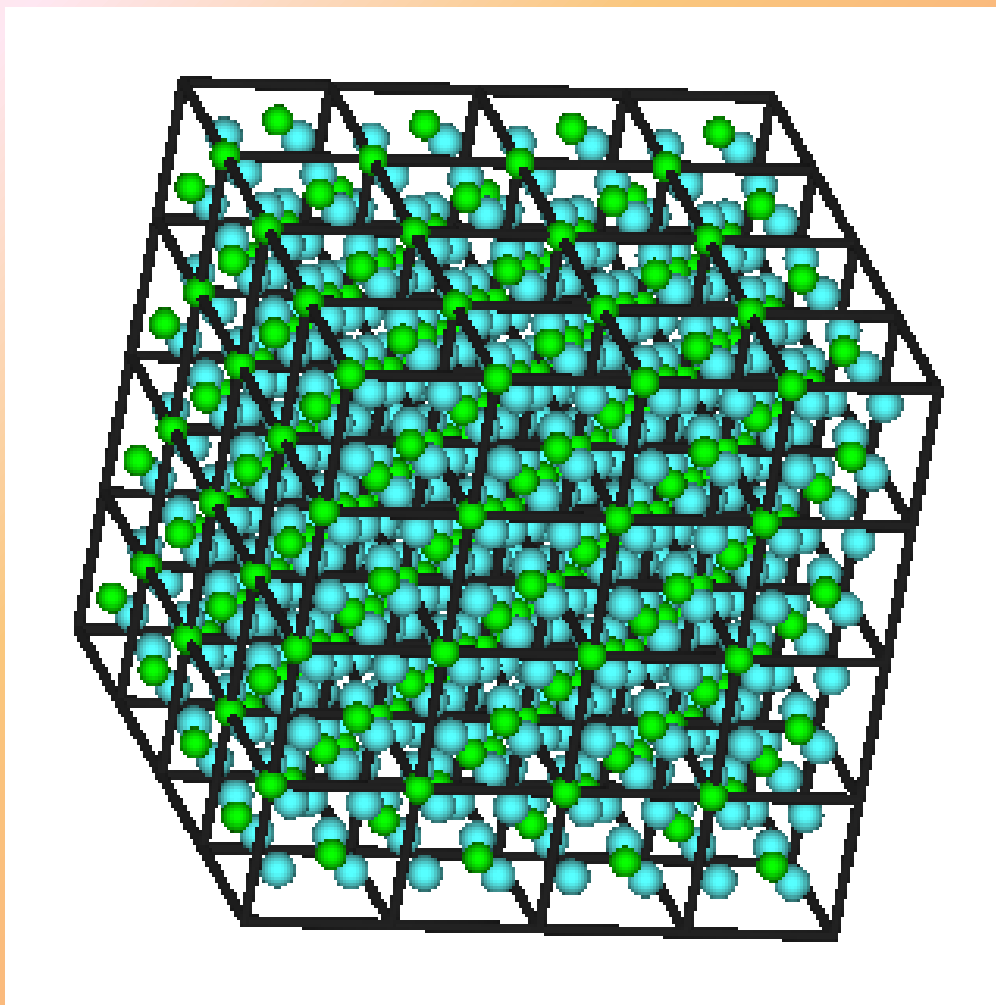
Atomy metalu – pojedyncza komórka elementarna



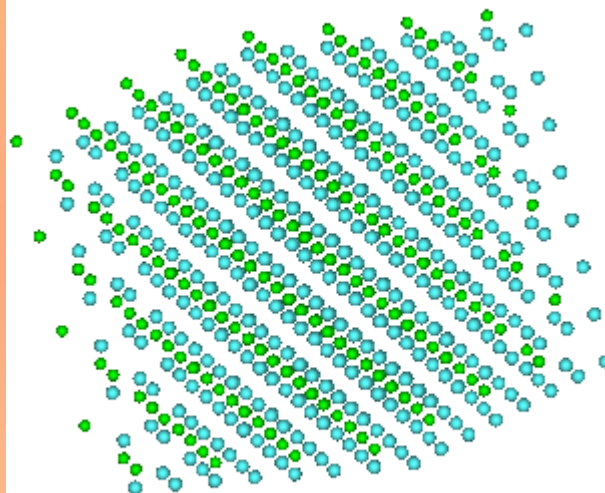
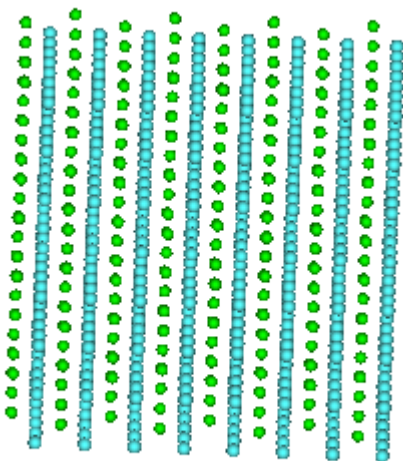
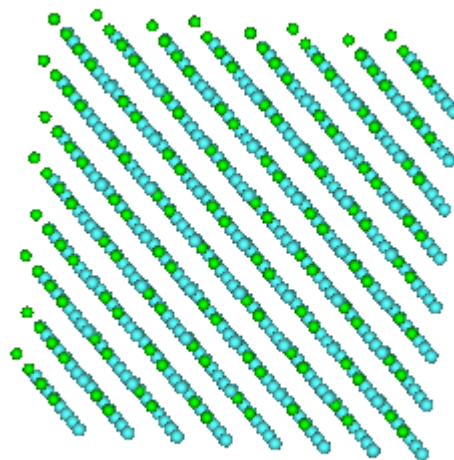
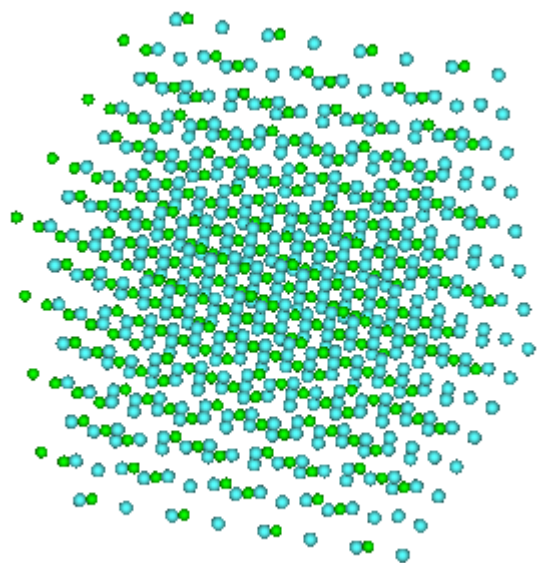
Fragment jednoatomowej sieci krystalicznej



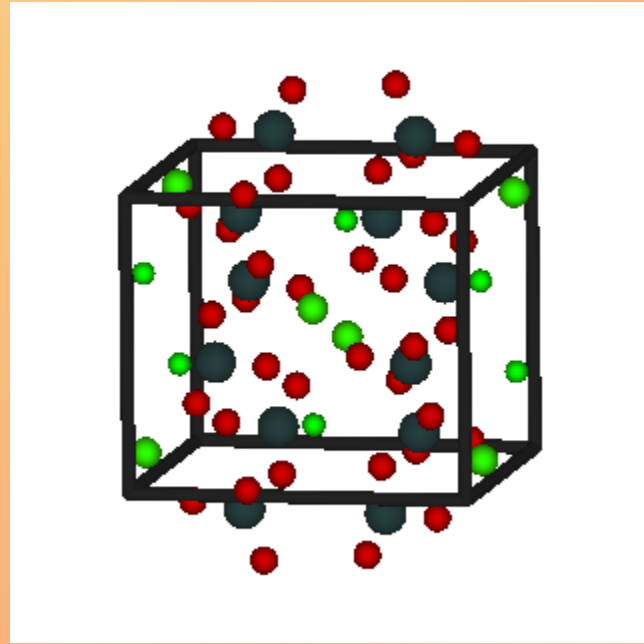
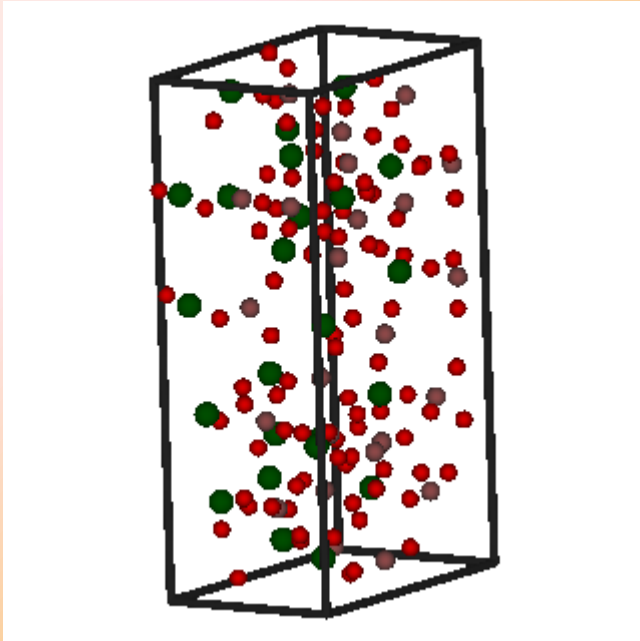
Komórka elementarna sieci krystalicznej



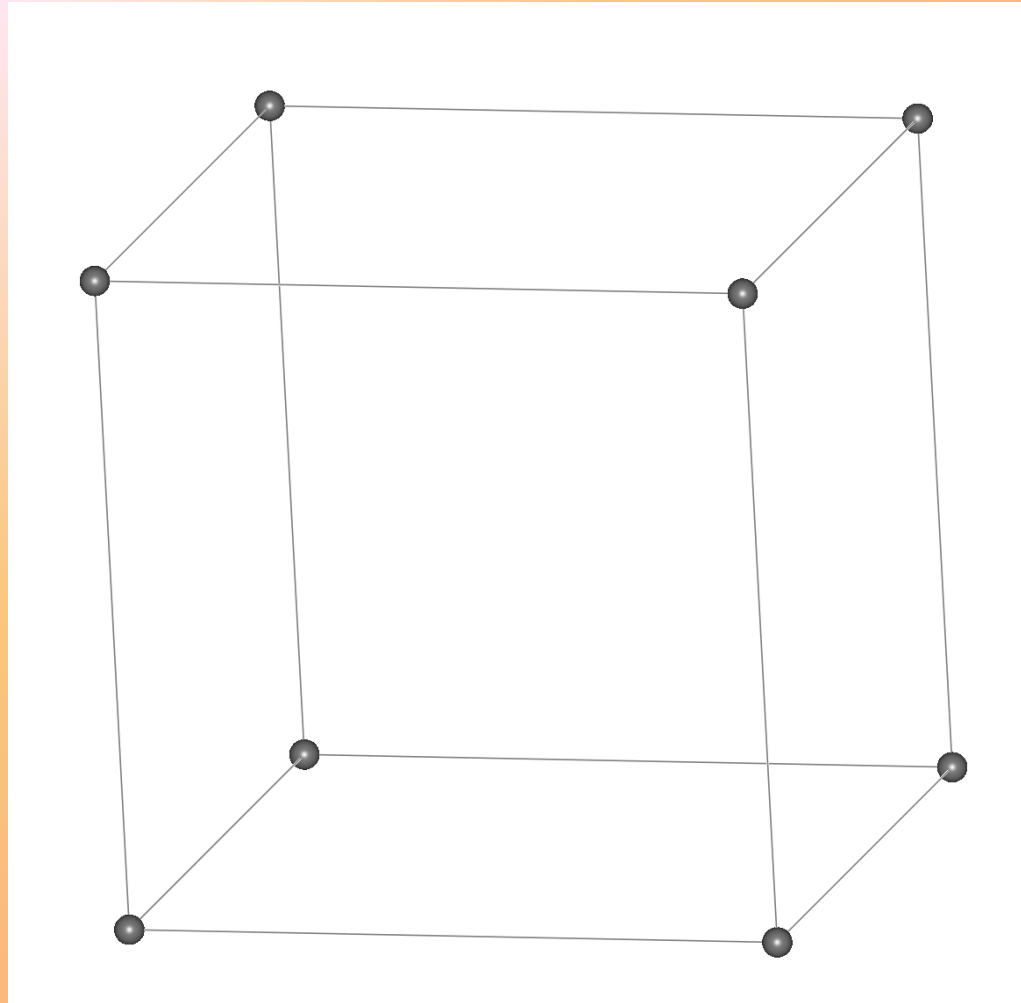
Fragment wieloatomowej sieci krystalicznej



XRD



Komórka elementarna sieci krystalicznej



Komórka elementarna sieci przestrzennej

Komórka elementarna (zasadnicza)



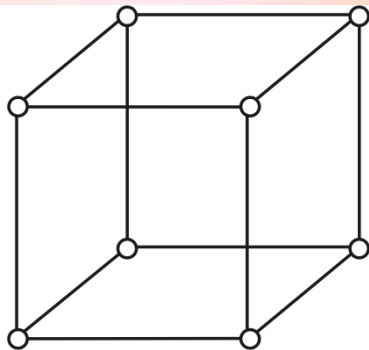
**Najmniejszy fragment, odtwarzający
cechy całej sieci**



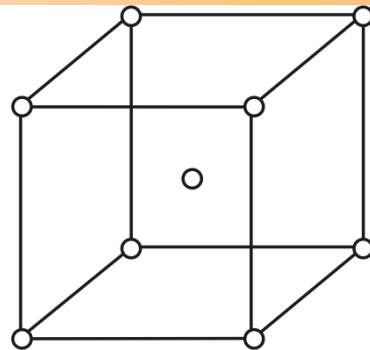
**Równoległościan utworzony przez
trzy nierównoległe translacje**



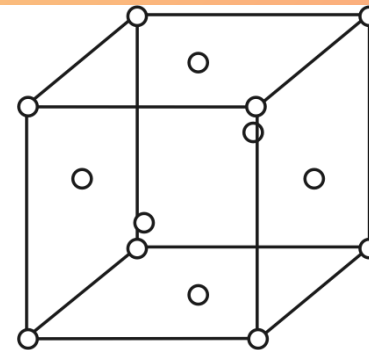
**Przez translację komórki w trzech
kierunkach można utworzyć całą sieć**



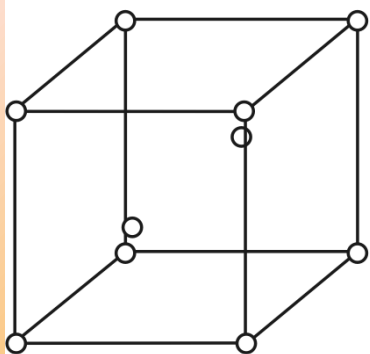
komórka prymitywna (P)



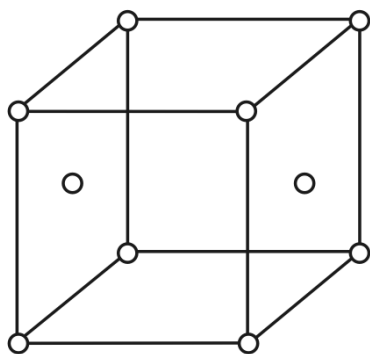
komórka
przestrzennie centrowana (I)



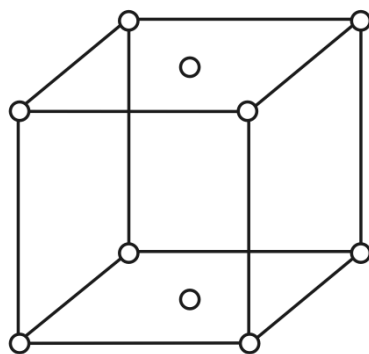
komórka
płasko centrowana (F)



A

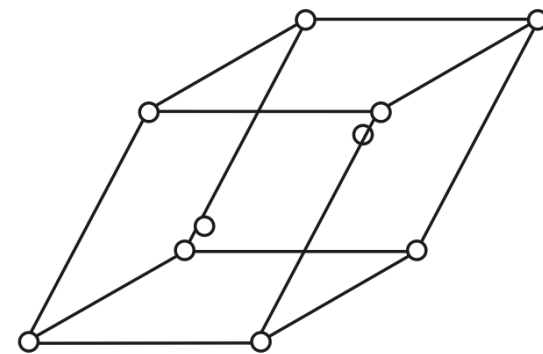


B



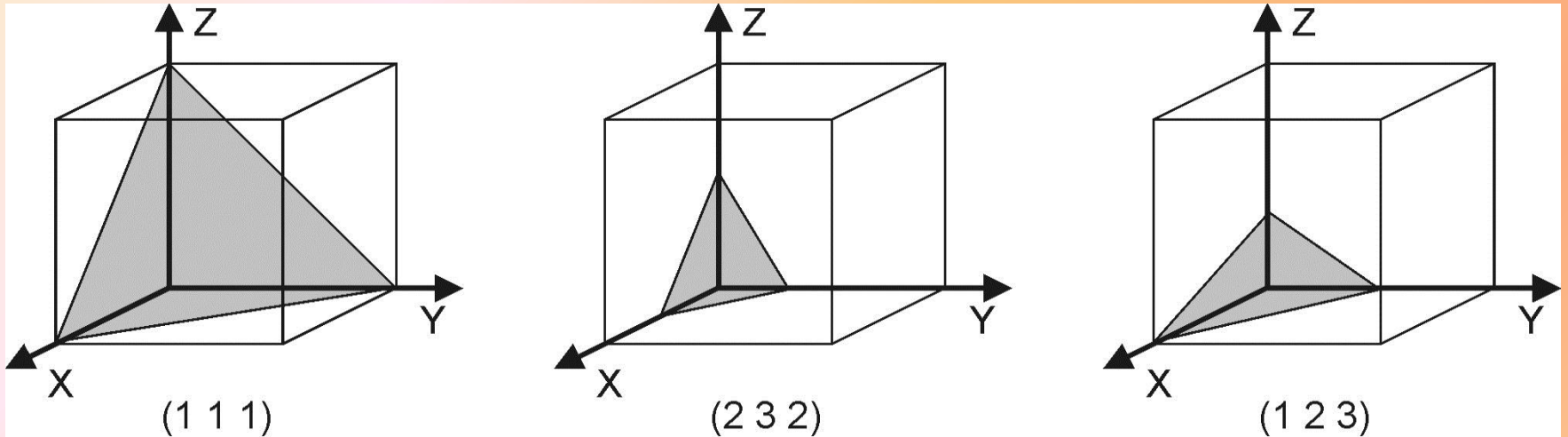
C

komórki centrowane na jednej parze ścian



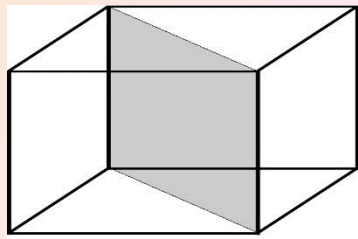
komórka romboedryczna (R)

Nazwa komórki	Symbol komórki	Położenia węzłów	Ilość węzłów n na komórkę
prymitywna	P	0,0,0	$n_P = 8 \cdot 1/8 = 1$
przestrzennie centrowana	I	0,0,0; 1/2,1/2,1/2	$n_I = 8 \cdot 1/8 + 1 = 2$
płasko centrowana	F	0,0,0; 1/2,1/2,0; 1/2,0,1/2; 0,1/2,1/2	$n_F = 8 \cdot 1/8 + 6 \cdot 1/2 = 4$
centrowana na jednej parze ścian	A	0,0,0; 0,1/2,1/2	$n_A = 8 \cdot 1/8 + 2 \cdot 1/2 = 2$
	B	0,0,0; 1/2,0,1/2	$n_B = 8 \cdot 1/8 + 2 \cdot 1/2 = 2$
	C	0,0,0; 1/2,1/2,0	$n_C = 8 \cdot 1/8 + 2 \cdot 1/2 = 2$
romboedryczna	R	0,0,0; 1/3,2/3,2/3; 2/3,1/3,1/3	$n_R = 8 \cdot 1/8 + 2 = 3$

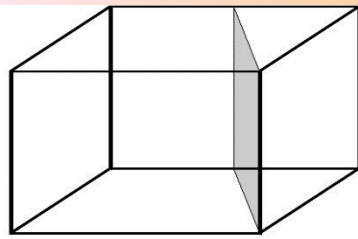


Wskaźniki (hkl) płaszczyzny sieciowej to liczby całkowite, określające ile razy odcinek odcięty na danej osi (przez najbliższą węzłowi 0,0,0 płaszczyznę sieciową) mieści się w danej jednostce osiowej.

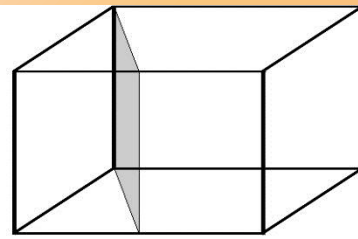
Wskaźnik „0” oznacza, że płaszczyzna jest równoległa do danej osi.



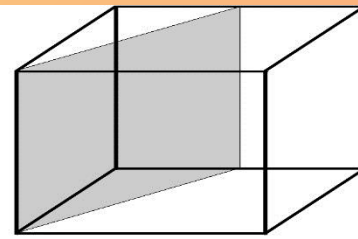
$(1 \bar{1} 0)$



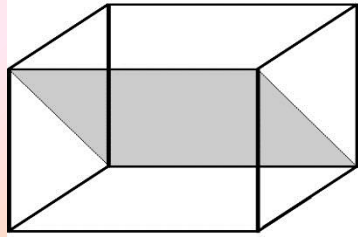
$(1 \bar{2} 0)$



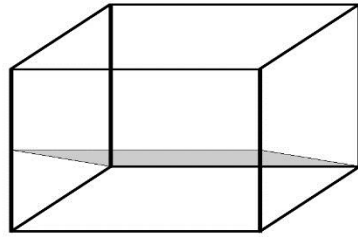
$(\bar{1} 2 0) = (1 \bar{2} 0)$



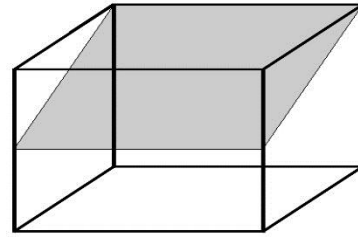
$(1 2 0)$



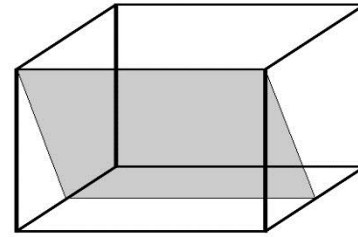
$(\bar{1} 0 1)$



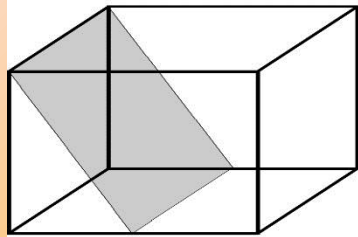
$(\bar{1} 0 2)$



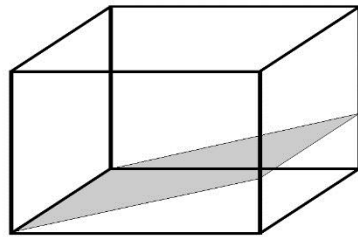
$(\bar{1} 0 \bar{2}) = (1 0 2)$



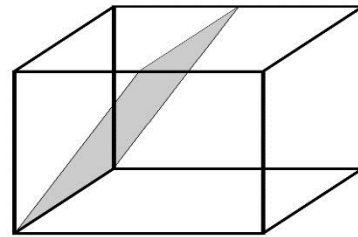
$(\bar{2} 0 1)$



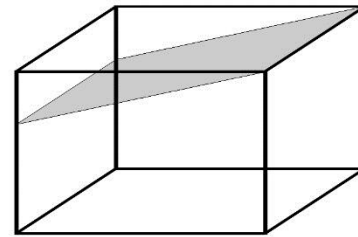
$(0 2 1)$



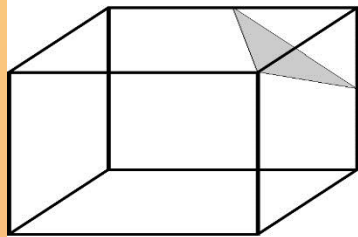
$(0 \bar{1} 3)$



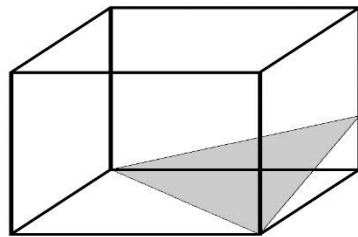
$(0 2 \bar{1})$



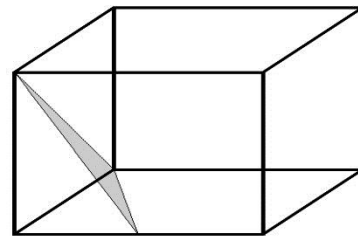
$(0 1 \bar{3}) = (0 \bar{1} 3)$



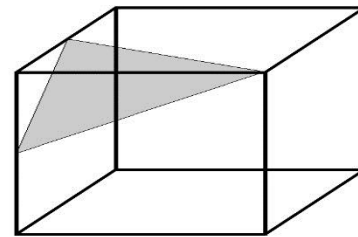
$(1 \bar{2} \bar{2}) = (\bar{1} 2 2)$



$(1 \bar{1} 3)$



$(\bar{1} 2 1)$



$(\bar{2} 1 \bar{2}) = (2 \bar{1} 2)$

$$h/a \begin{vmatrix} h/a & \cos\gamma & \cos\beta \\ k/b & 1 & \cos\alpha \\ l/c & \cos\alpha & 1 \end{vmatrix} + k/b \begin{vmatrix} 1 & h/a & \cos\beta \\ \cos\gamma & k/b & \cos\alpha \\ \cos\beta & l/c & 1 \end{vmatrix} + l/c \begin{vmatrix} 1 & \cos\gamma & h/a \\ \cos\gamma & 1 & k/b \\ \cos\beta & \cos\alpha & l/c \end{vmatrix}$$

$$1/d_{hkl}^2 =$$

$$\begin{vmatrix} 1 & \cos\gamma & \cos\beta \\ \cos\gamma & 1 & \cos\alpha \\ \cos\beta & \cos\alpha & 1 \end{vmatrix}$$

Odległością międzypłaszczyznową d_{hkl} nazywamy odległość między dwoma najbliższymi płaszczyznami sieciowymi o tych samych wskaźnikach (hkl) (płaszczyznami do siebie równoległymi).

układ regularny

$$1/d_{hkl}^2 = h^2/a^2 + k^2/a^2 + l^2/a^2 = (h^2 + k^2 + l^2) / a^2$$

układ tetragonalny

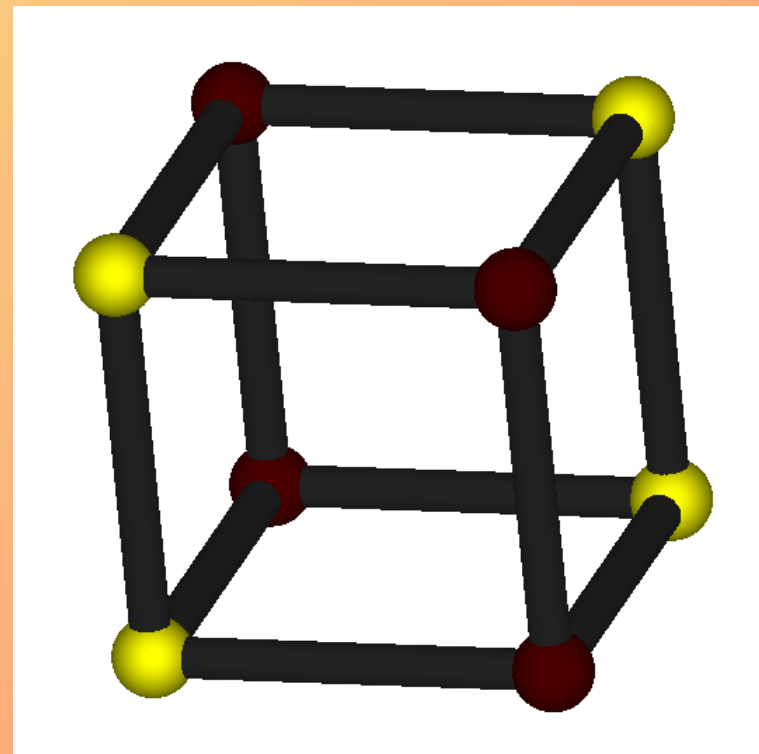
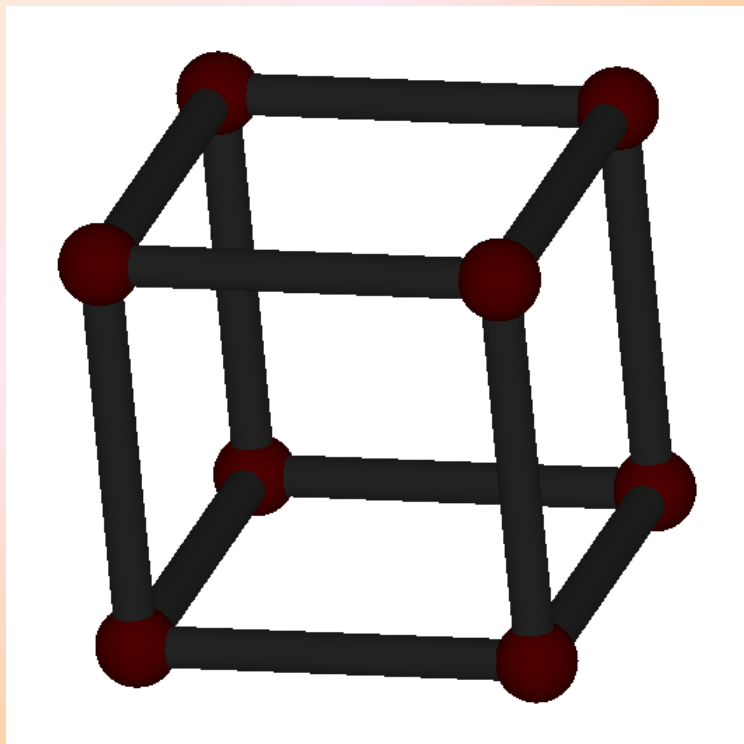
$$1/d_{hkl}^2 = h^2/a^2 + k^2/a^2 + l^2/c^2 = (h^2 + k^2) / a^2 + l^2/c^2$$

układ ortorombowy

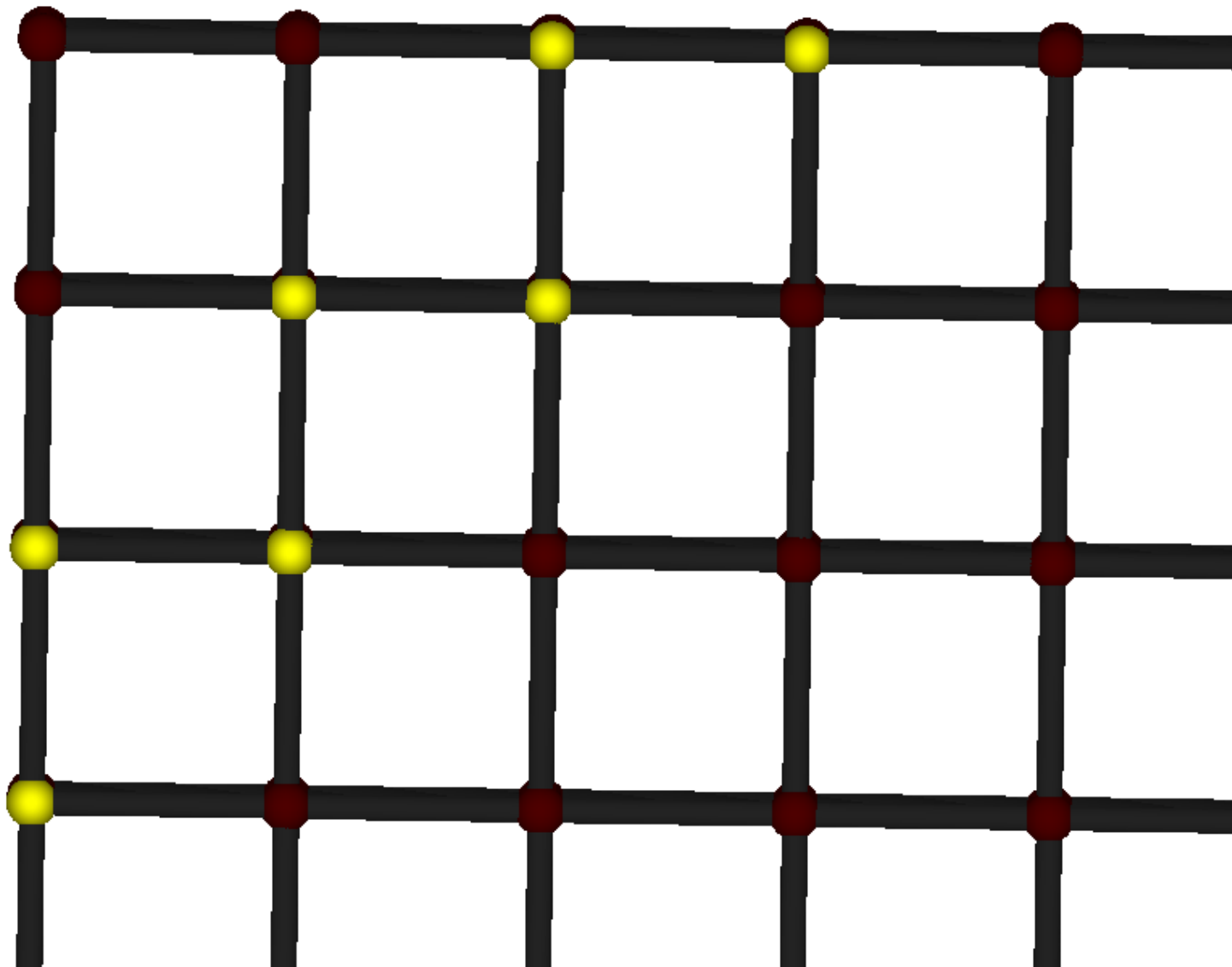
$$1/d_{hkl}^2 = h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2$$

układ heksagonalny

$$1/d_{hkl}^2 = 4/3 (h^2 + hk + k^2) / a^2 + l^2/c^2$$



Węzły na płaszczyźnie (110)



XRD

