

**ZADANIA I TEMATY NA ĆWICZENIA 1h
DO WYKŁADU ‘KRYSZTAŁY, CIECZE, CIEKŁE KRYSZTAŁY’**

Wykład:

III. Dyfrakcja [promieni X, neutronów, elektronów] na kryształach [warunki dyfrakcji; metody dyfrakcji monokryształów i polikryształów] oraz na cieczy.

Ćwicz.

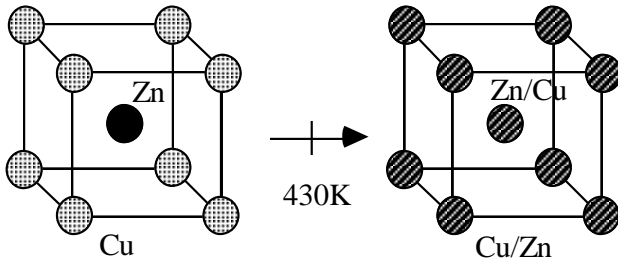
Zad.III.1. A) Wychodząc ze wzoru na amplitudę rozpraszania promieniowania X na kryształach $F(\underline{S})$ i z warunku Lauego ($2\pi\underline{S} = \underline{L}^*$, gdzie $\underline{L}^* = h\underline{a}^* + k\underline{b}^* + l\underline{c}^*$ - wektor sieci odwrotnej) wyprowadź wzór na amplitudę rozpraszania na komórce elementarnej w postaci tzw. czynnika strukturalnego $F_{hkl} := F(2\pi\underline{S} = \underline{L}^*)$ przy założeniu, że położenia atomów są opisane jako frakcje stałych sieci rzeczywistej $\underline{r}_j = x_j\underline{a} + y_j\underline{b} + z_j\underline{c}$ a ich amplitudy rozpraszania przez f_j . Wynik:

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)$$

B) Oblicz reguły zerowania się czynnika strukturalnego F_{hkl} dla sieci fcc i bcc. Pokaż, że węzły (hkl) o niezerowych F_{hkl} tworzą sieci odwrotne typu odpowiednio: bcc i fcc.

Zad.III.DODATKOWE Oblicz natężenie wiązki ugiętej na sieci prostokątnej określonej przez wektory $\underline{r}_{n,m} = 2an\hat{x} + am\hat{y}$ (a - stała sieci, n, m – liczby całkowite) z bazą (0,0) i (1/2, ρ). Określ kierunki wygaszenia wiązki ugiętej. Przedyskutuj wynik dla różnych wartości ρ :

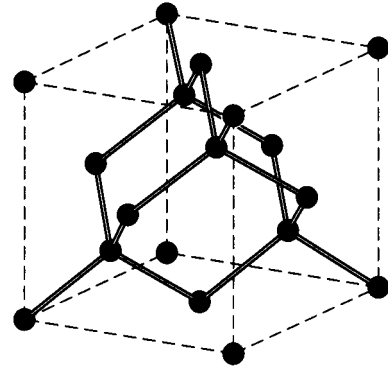
Zad.III.2 Przy pomocy wiązki neutronów o $\lambda=0.116$ nm dokonano metodą proszkową dyfrakcji stopu CuZn. Stop ten posiada regularną komórkę elementarną ($a=0.2951$ nm) o strukturze typu CsCl (patrz rys.) z Cu ułożonym w pozycji (000) i Zn w położeniu (1/2 1/2 1/2). Powyżej $T=430$ K w stopie tym zachodzi przejście fazowe, w wyniku którego następuje rozporządkowanie bazy tzn. obie jej pozycje (000) i (1/2 1/2 1/2) są obsadzone statystycznie przez Cu i Zn po 50%. Jak będzie wyglądał dyfraktogram tego stopu dla fazy uporządkowanej i nieuporządkowanej (policz kąty do 30° dla których pojawią się refleksy w obu przypad.). **Uwaga** na wygaszenia systematyczne!



Zad.III.3. Jak będzie wyglądał dyfraktogram proszkowy (podaj kąty refleksów) diamentu i buckminsterfullerene’u C_{60} (patrz Physics Today, Nov. 1991, p.22) uzyskany przy pomocy lampy X Cu o długości fali $\lambda(K\alpha)=0.15418$ nm? Diament ma strukturę fcc o stałej $a=0.356$ nm. W fullerenie kule C_{60} są ułożone także w strukturze fcc ale o stałej $a=1.4198$ nm. Uwaga na wygaszenia systematyczne!

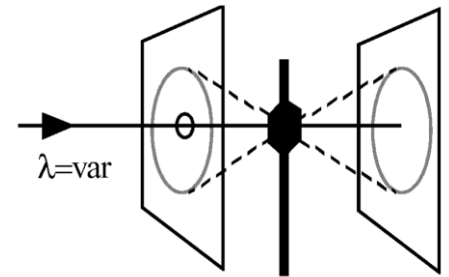


C₆₀



diament, fcc, baza: $\{(0\ 0\ 0), (1/4\ 1/4\ 1/4)\}$

Zad.III.4. Metoda Lauego. W metodzie Lauego bada się ugięcie polichromatycznej wiązki promieniowania X na płaszczyznach nieruchomego monokryształu. W trakcie pomiaru kąt padania promieni X na kryształ jest wielkością stałą. Rozważ wiązki rentgenowską o długości λ z przedziału, określonego frakcjami stałej a sieci regularnej, $\frac{a}{3} \leq \lambda \leq \frac{2}{3}a$ i padającą na tę sieć wzdłuż kierunku $[-100]$. Korzystając z konstrukcji Ewalda znajdź płaszczyzny typu $(hk0)$ od których obserwuje się refleksy.



Zad.III.5. W kamerze obrotu pojedynczego kryształu o średnicy $2R=57.3\text{mm}$ jest umieszczony monokryształ obracający się wokół osi a (patrz rysunek poniżej). Na monokryształ pada wiązka promieniowania o długości fali $\lambda=1.5418\text{ \AA}$. Otrzymano warstwicę zerową i cztery warstwicę wyższego rzędu. Odstępy między symetrycznymi warstwicami wynoszą odpowiednio: $2h_1=10.2\text{mm}$, $2h_2=21.6\text{mm}$, $2h_3=35.3\text{mm}$ i $2h_4=56.6\text{mm}$. Oblicz stałą sieciową a_0 .

