Jakub Zbrzezny
Nr indeksu: 286689

Projekt 1 - dyfraktometria rentgenowska
Nr zestawu: 4

12 stycznia 2021

Celem naszego zadania jest dla **Platyny o strukturze fcc** i wartości **stałej sieciowej** dzielonej przez $A°$, równej 3,92, obliczenie położenia maksimów dyfrakcyjnych w zakresie kątów $20° \leqslant 2\theta \leqslant 90°$ dla źródka $\lambda = 1,4767A°$. Dodatkowo mamy uwzględnić wpływ czynnika struktury na występowanie maksimum dyfrakcyjnego.

Jak wiemy, w strukturze fcc mamy 4 różne położenia atomów w komórce elementarnej:

$$A_1 = (0,0,0), \ \ A_2 = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0), \ \ A_3 = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), \ \ A_4 = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}).$$

Dla wskaźników Millera płaszczyzny h, k, l, najpierw obliczymy odległość d_{hkl} między sąsiednimi płaszczyznami (hkl).
Mamy sieć kubiczną, a zatem odległość d_{hkl} jest równa:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}},$$

gdzie a jest stałą sieciową naszego pierwiastka, dzieloną przez $A°$.
Następnie obliczymy kąt 2θ między falą padającą i odbitą. Skorzystamy z prawa Wulfa-Braggów. Wzmocnienie dyfrakcyjne nastąpi, jeżeli spełniony będzie warunek:

$$n\lambda = 2\, d_{hkl} \sin\theta,$$

gdzie n jest rządem ugięcia fali, a λ jest długością fali padającej.
Przyjmujemy, że $n = 1$.
Potem wyznaczymy czynnik struktury zdefiniowany następująco:

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{4} f_j \exp[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)].$$

Sumę liczymy po wszystkich atomach w komórce elementarnej. Współczynnik f_j jest czynnikiem atomowym i określa zdolność j-tego atomu w komórce elementarnej (o współrzędnych x_j, y_j, z_j) do rozpraszania promieniowania

rentgenowskiego. Przyjmujemy, że $f_1 = f_2 = f_3 = f_4 = 1$.
Dyfrakcja nastąpi, gdy czynnik F_{hkl} jest niezerowy.

Zatem sprawdzimy, dla jakich współczynników h, k, l, czynnik F_{hkl} wynosi 0.

Zauważmy, że, gdy $2(hx_j + ky_j + lz_j)$ jest parzyste, to $\exp[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] = 1$, ponieważ $\exp(2\pi i) = 1$.
Natomiast, gdy $2(hx_j + ky_j + lz_j)$ jest nieparzyste, to $\exp[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)] = -1$, gdyż $\exp(\pi i) = -1$.

Stąd $F_{hkl} = 0$, jeżeli dla dokładnie dwóch j, $2(hx_j + ky_j + lz_j)$ jest parzyste oraz dla innych dwóch j, $2(hx_j + ky_j + lz_j)$ jest nieparzyste.

A_2, A_3, A_4 są wszystkimi permutacjami 3-elementowego zbioru z dwóch liczb o wartości: $\frac{1}{2}$ i jednej liczby równej 0.

Mamy 4 następujące przypadki:

1. $h = 2k_1 + 1$, $k = 2k_2 + 1$, $l = 2k_3$

   $2(hx_1 + ky_1 + lz_1) = 0$ - liczba parzysta
   $2(hx_2 + ky_2 + lz_2) = 2(k_1 + k_2) + 2$ - liczba parzysta
   $2(hx_3 + ky_3 + lz_3) = 2(k_1 + k_3) + 1$ - liczba nieparzysta
   $2(hx_4 + ky_4 + lz_4) = 2(k_2 + k_3) + 1$ - liczba nieparzysta

2. $h = 2k_1$, $k = 2k_2$, $l = 2k_3 + 1$

   $2(hx_1 + ky_1 + lz_1) = 0$ - liczba parzysta
   $2(hx_2 + ky_2 + lz_2) = 2(k_1 + k_2)$ - liczba parzysta
   $2(hx_3 + ky_3 + lz_3) = 2(k_1 + k_3) + 1$ - liczba nieparzysta
   $2(hx_4 + ky_4 + lz_4) = 2(k_2 + k_3) + 1$ - liczba nieparzysta

3. $h = 2k_1$, $k = 2k_2$, $l = 2k_3$

   $2(hx_1 + ky_1 + lz_1) = 0$ - liczba parzysta
   $2(hx_2 + ky_2 + lz_2) = 2(k_1 + k_2)$ - liczba parzysta
   $2(hx_3 + ky_3 + lz_3) = 2(k_1 + k_3)$ - liczba parzysta
   $2(hx_4 + ky_4 + lz_4) = 2(k_2 + k_3)$ - liczba parzysta

4. $h = 2k_1 + 1$, $k = 2k_2 + 1$, $l = 2k_3 + 1$

   $2(hx_1 + ky_1 + lz_1) = 0$ - liczba parzysta
   $2(hx_2 + ky_2 + lz_2) = 2(k_1 + k_2) + 2$ - liczba parzysta
   $2(hx_3 + ky_3 + lz_3) = 2(k_1 + k_3) + 2$ - liczba parzysta
   $2(hx_4 + ky_4 + lz_4) = 2(k_2 + k_3) + 2$ - liczba parzysta

Zatem, czynnik F_{hkl} będzie niezerowy, gdy wszystkie współczynniki h, k, l

są parzyste lub wszystkie h, k, l są nieparzyste.

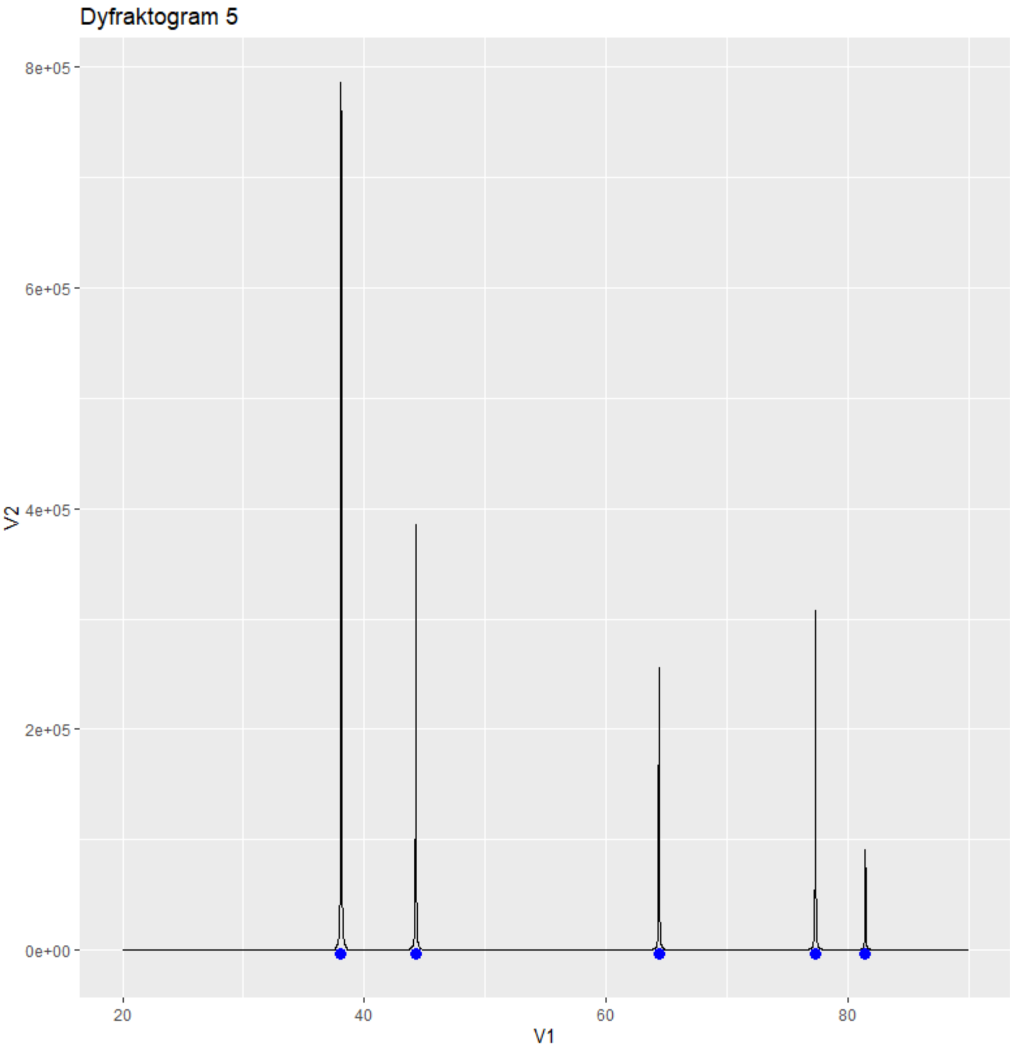
Wyniki zapiszemy dla h, k, l, dla których czynnik F_{hkl} jest niezerowy. Obliczenia zostały przeprowadzone w programie *Excel*.

h	k	l	d_{hkl}	2θ	F_{hkl}
0	0	2	1,96	44,26	4
0	2	0	1,96	44,26	4
0	2	2	1,39	64,38	4
1	1	1	2,26	38,08	4
1	1	3	1,18	77,32	4
1	3	1	1,18	77,32	4
1	3	3	0,90	110,37	4
2	0	0	1,96	44,26	4
2	0	2	1,39	64,38	4
2	2	0	1,39	64,38	4
2	2	2	1,13	81,46	4
3	1	1	1,18	77,32	4
3	1	3	0,90	110,37	4
3	3	1	0,90	110,37	4
3	3	3	0,75	156,32	4

Następnie wybieramy wartości tylko dla kątów $20° \leqslant 2\theta \leqslant 90°$. Wpisujemy do pliku tekstowego.

Zatem dyfraktogramem odpowiadającym naszemu pierwiastkowi, jest **dyfraktogram nr 5**.

Na następnej stronie został zamieszczony wykres dyfraktogramu (zaznaczone punkty na wykresie są maksimami dyfrakcyjnymi, które wpisaliśmy do naszego pliku tekstowego). Wykres został wykonany w programie *R* za pomocą funkcji *ggplot* z pakietu *ggplot2*.


Dyfraktogram 5
8e+05
6e+05
4e+05
2e+05
0e+00
V2
20
40
60
80
V1