

Out[6]= 1.07503

Видим, что условие дифракции не выполняется, поскольку синус угла больше 1.

Рассматриваем подложку (210). Угол будет:

Out[10]= 0.471432

Синус угла меньше 1, однако не выполнено условие отражения для пространственной группы Fd-3m:

Out[11]=

$h + k$	Нет
---------	-----

Следующий вектор (420). Сразу проверяем условия отражения:

Out[15]=

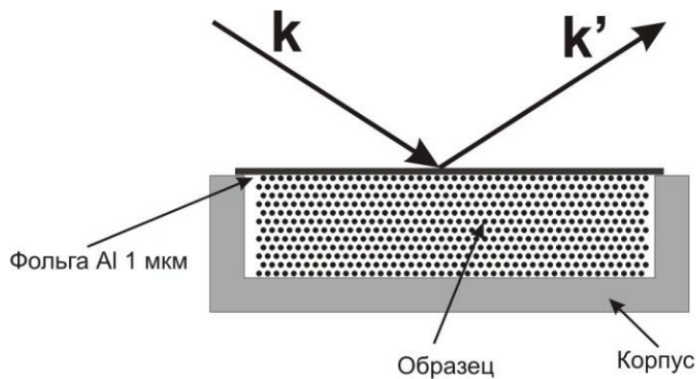
$h + k$	Да
$h + l$	Да
$k + l$	Да

Теперь находим угол 2θ (в градусах):

Out[16]= 141.076

Задача 2

Все события в один день! После подложек Вам привезли специальную ячейку для исследования в режиме *in situ*. Ее конструкция проста (k , k' - волновые вектора первичного и вторичного пучков):



Вы работаете в режиме симметричного сканирования на $\text{Cr K}\alpha_1$, $\lambda = 2.2897 \text{ \AA}$, геометрия “на отражение”. Определите угловую зависимость ослабления интенсивности рефлексов фольгой. Насколько сильно уменьшится интенсивность рефлекса на 10° 2θ ? На 50° 2θ ? Массовый коэффициент поглощения $\text{Cr K}\alpha_1$ для алюминия $157.5 \text{ cm}^2/\text{g}$, плотность алюминия 2.7 g/cm^3 .

Решение

In[17]:= $\lambda = 2.29 \text{ \AA}$;

$\rho = 2.7 \text{ g/cm}^3$;

$\mu = 157.5 \text{ cm}^2/\text{g}$;

$z = 1 \text{ }\mu\text{m}$;

Закон Бугера-Ламберта-Бэра:

$$I_x = I_0 e^{-\mu x}$$

Закон Мозли:

$$x = \frac{2 \rho z}{\sin(\theta)}$$

Коэффициент 2 отражает, что луч проходит фольгу 2 раза.

Итоговая формула для отношения будет иметь вид:

$$\frac{I_x(2\theta)}{I_0} = e^{-\mu \frac{2\rho z}{\sin(\theta)}}$$

Находим искомые отношения $\left(\frac{I(10^\circ)}{I_0} \text{ и } \frac{I(50^\circ)}{I_0}\right)$:

Out[23]=	10°	0.376876
	50°	0.817712

Задача 3

Рассчитайте интенсивность рефлексов (100) и (111) на дифрактограмме поликристаллического образца CuAu_3 ($a = 3.965 \text{ \AA}$, S.G. $Pm-3m$, координаты атомов Cu(0,0,0) и Au(0.5,0.5,0.0), тепловыми колебаниями пренебрегайте, заселенности позиций единичные). Для упрощения расчетов считайте, что рассеивающий фактор атома $F = Ze^{\frac{\sin \theta}{\lambda}}$ ($\lambda = [A]$ - показатель экспоненты в \AA^{-1} , Z - атомный номер), аномальным рассеянием можно пренебречь. Съемка проводится на излучении $\text{CuK}\alpha_1$, $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$, геометрия “на отражение”, монохроматор отсутствует. Считайте единичными интенсивность первичного пучка, абсорбционный фактор, текстурный фактор и фактор экстинкции.

Решение

План действий:

1. Углы дифракционные $\left(d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}\right) \rightarrow 2 d_{hkl} = \sin[q_{hkl}] = \lambda \rightarrow 2\theta$
2. $p(100) = 6$, $p(111) = 8$
3. $\text{LPG} = 2\theta$
4. $F_{\text{Cu}}, F_{\text{Au}} < -2\theta$
5. $(100) = F_{\text{Cu}} + F_{\text{Au}} - F_{\text{Au}} - F_{\text{Au}} = F_{\text{Cu}}(2\theta) - F_{\text{Au}}(2\theta)$
6. $\text{LPG}(2\theta) * p(100) * |F_{100}|^2$

Решение

Начнем с уравнения интенсивности рефлекса на дифрактограмме. В полной форме оно имеет вид:

$$I_{hkl} = p_{hkl} \cdot A \cdot \text{LPG} \cdot T(hkl) \cdot E_{hkl} \cdot |F_{hkl}|^2$$

Однако по условию:

$$A = 1, T(hkl) = 1, E_{hkl} = 1$$

поэтому:

$$I_{hkl} = p_{hkl} \cdot \text{LPG} \cdot |F_{hkl}|^2.$$

Теперь будем выражать переменные, входящие в полученное уравнение по порядку.

1. p_{hkl} - фактор повторяемости для рефлексов 100 и 111 соответственно:

$$\text{In}[24]:= p = \{6, 8\};$$

2. Теперь рассматриваем LPG- фактор. Для его нахождения нам нужны значения углов 2θ . Для этого сначала находим межплоскостные расстояния d_{hkl} по формуле (1).

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (1)$$

Out[29]=

d_{hkl}	100	3.965 Å
	111	2.28919 Å

Затем используя закон Брэгга (2) находим значения углов 2θ .

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

$$\sin(\theta) = \frac{\lambda n}{2 d_{hkl}} \quad (2)$$

Out[33]=

θ°	100	22.4106
	111	39.3375

Для пространственной группы Pm – 3 m отсутствуют условия погасания и первые пики рассматриваемых рефлексов будут наблюдаться на полученных углах.

LPG - фактор находится по формуле:

$$LPG[\theta] = \frac{1 + \cos(2\theta)^2}{\sin(\theta)^2 \cos(\theta)}$$

Находим соответствующие значения из полученных углов:

Out[36]=

LPG	100	50.0683
	111	14.9815

3. Теперь ищем структурную амплитуду. Её формула имеет вид:

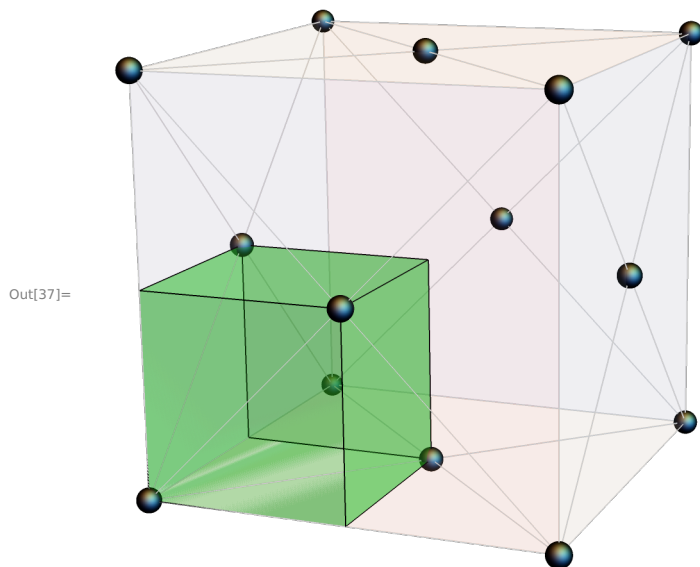
$$F_{hkl} = \sum_j g_j t_j(q_{hkl}) e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)} \cdot F_j^{\text{atom}}(q_{hkl})$$

По условию мы пренебрегаем тепловыми колебаниями, откуда $t_j(q_{hkl}) = 1$, заселенности позиций g_j так же единичные.

Суммируем по атомам в элементарной ячейке - по одному Cu и по 3м Au. Формула принимает вид:

$$F_{hkl} = \sum_j e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)} \cdot Z \cdot e^{-\frac{\sin(\theta)}{\lambda}}$$

С учетом структуры решетки, определяем координаты атомов в элементарной ячейке (выделена зеленым для наглядности).



Получаем, что для Cu координаты (0,0,0), а для атомов Au: $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

In[38]:=

Наконец структурные амплитуды для 100 и 111 соответственно ($Z_{Cu} = 29$, $Z_{Au} = 79$):

Out[44]=

F_{hkl}	100	$-50 e^{-0.126103/\text{\AA}}$
	111	$266 e^{-0.218418/\text{\AA}}$

4. В итоге интенсивности:

Out[46]=

I	100	$(7.51025 \times 10^5) e^{-2.52207 \times 10^{-1}/\text{\AA}}$
	111	$(8.48026 \times 10^6) e^{-4.36835 \times 10^{-1}/\text{\AA}}$

Задача 4

На рентгенограмме ромбического соединения $GdFeO_3$ имеются следующие линии: 3.870 Å (110), 2.806 Å (020) и 2.725 Å (112). Определите параметры элементарной ячейки. Определите число формульных единиц на ячейку Z , если $\rho_{\text{пикн.}} = 7.510 \text{ г/см}^3$ ($M_{Gd} = 157.25$; $M_{Fe} = 58.85$; $M_O = 16.00$).

Решение

Вектор обратной решетки для ромбического соединения:

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

Записываем систему уравнений в матричном виде исходя из рефлексов:

$$\begin{pmatrix} h_1^2 & k_1^2 & l_1^2 \\ h_2^2 & k_2^2 & l_2^2 \\ h_3^2 & k_3^2 & l_3^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a^{-2} \\ b^{-2} \\ c^{-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{110}^{-2} \\ d_{020}^{-2} \\ d_{112}^{-2} \end{pmatrix}$$

Находим значения a , b , c соответственно:

$$\text{In[47]:= } \{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}\} = \text{LinearSolve} \left[\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}^2, \begin{pmatrix} 3.87 \text{ \AA} \\ 2.806 \text{ \AA} \\ 2.725 \text{ \AA} \end{pmatrix}^{-2} \right]^{-1/2}$$

$$\text{Out[47]= } \left\{ \left\{ 5.34385 \text{ \AA} \right\}, \left\{ 5.612 \text{ \AA} \right\}, \left\{ 7.67533 \text{ \AA} \right\} \right\}$$

Зная значения a , b , c можем определить число формульных единиц в элементарной ячейке

$$z = \frac{\rho \cdot V \cdot N_a}{\sum_{i=1}^n M_i}$$

$$\text{Out[51]= } 3.94178$$

Задача 5

Рефлекс (311) нанопорошка γ – Al_2O_3 (Пр. гр. $Fd-3m$, $a = 7.9448 \text{ \AA}$) по результатам профильного анализа хорошо аппроксимируется функцией Лоренца и имеет полуширину 0.3440° . Считая инструментальный вклад в полуширину линейно-аддитивным и равным 0.05° , рассчитайте эффективный размер ОКР. Съемка проводилась на излучении $\text{Cu } K \alpha_1$.

Решение

Исходные данные :

```
In[52]:= h = 3;
          k = 1;
          l = 1;
          a = Quantity[7.9448, "Angstroms"];
          FWHM = 0.3440 °;
          InstrumentalError = 0.05 °;
```

Формула Шеррера:

$$r = \frac{\lambda K}{\beta \cos(\theta)}$$

Уравнение Брэгга

$$2 d_{\text{hkl}} \sin(\theta) = \lambda$$

Ищем d_{hkl} как $d_{\text{hkl}} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$:

$$\text{Out[58]= } 2.39545 \text{ \AA}$$

Теперь ищем угол θ из уравнения Брэгга:

$$\text{Out[59]= } 0.327474$$

Ищем интегральную ширину из полуширины с учетом инструментального вклада :

$$\text{Out[60]= } 0.00806018$$

Наконец, находим эффективный размер (считаем $K = 1$):

$$r_{\text{out}[61]} = 201.917 \text{ \AA}$$