

Debyeova-Scherrerova metoda určení jemné struktury materiálu

Tomáš Maršálek (A10B0632P)

měřeno 28. listopadu 2011

1 Měřicí potřeby a přístroje

exponovaný rentgenový snímek, zařízení pro odečítání reflexí ze snímku

2 Naměřené hodnoty

Naměřené reflexní úhly 2θ , mezirovinné vzdálenosti d , Millerovy indexy (h, k, l) a mřížková konstanta a :

| 2θ | θ | $\sin \theta$ | d [Å] | $h\ k\ l$ | a [Å] |
|-----------|----------|---------------|---------|-----------|---------|
| 0.522 | 0.261 | 0.2580 | 3.468 | 1 1 1 | 6.007 |
| 0.616 | 0.308 | 0.3031 | 2.952 | 0 0 2 | 5.904 |
| 0.889 | 0.444 | 0.4300 | 2.081 | 2 0 2 | 5.886 |
| 1.064 | 0.532 | 0.5072 | 1.764 | 1 1 3 | 5.850 |
| 1.124 | 0.562 | 0.5328 | 1.679 | 2 2 2 | 5.816 |
| 1.334 | 0.667 | 0.6186 | 1.446 | 0 0 4 | 5.784 |
| 1.491 | 0.745 | 0.6783 | 1.319 | 3 3 1 | 5.749 |
| 1.540 | 0.770 | 0.6961 | 1.285 | 4 2 0 | 5.746 |
| 1.736 | 0.868 | 0.7630 | 1.173 | 4 2 2 | 5.747 |
| 1.908 | 0.954 | 0.8157 | 1.097 | 5 1 1 | 5.700 |
| 2.184 | 1.092 | 0.8875 | 1.008 | 4 4 0 | 5.702 |
| 2.408 | 1.204 | 0.9334 | 0.958 | 5 3 1 | 5.668 |
| 2.482 | 1.241 | 0.9461 | 0.946 | - | - |

Vlnová délka použitého RTG záření je $\lambda = 1.79021$ Å. Při vzniku rentgenového snímku byl použit filtr, proto není nutné vyloučit reflexe od záření K_β .

3 Výpočty

Mezirovinné vzdálenosti zjistíme z naměřených reflexních úhlů 2θ pomocí Braggovy rovnice:

$$d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}$$

Z Hull-Davyeho křivek se poté určí Millerovy indexy. Protože víme, že vzorek je NaCl, který krystalizuje v kubické soustavě, mřížkovou konstantu získáme ze vzorce:

$$a = d\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

kde trojice (h, k, l) jsou Millerovy indexy příslušející mezirovinné vzdálenosti d .

Millerovy indexy poslední reflexe určíme ze vztahu

$$h^2 + k^2 + l^2 \leq \frac{4a^2}{\lambda^2}$$

kde pravá strana je zaokrouhlená na nejbližší nižší celé číslo, které vyhovuje levé straně rovnice pro celá čísla.

Millerovy indexy a jednotlivě vypočtené mřížkové konstanty jsou uvedeny v tabulce. Výsledná mřížková konstanta je aritmetický průměr vypočtených, odpovídá $\bar{a} = 5.80 \pm 0.09$. Poslední reflexe odpovídá Millerovým indexům (6, 2, 1) a (4, 4, 3).

4 Závěr

Měření bylo bohužel nepřesné. Pravděpodobně se stala chyba při určování středů vstupního a výstupního otvoru. Při výpočtu byla zřejmě vynechána některá reflexe, proto aritmetický průměr šesti reflexí neurčil správný střed otvoru. U krystalu NaCl reflektují pouze roviny, které mají Millerovy indexy pouze liché nebo pouze sudé. Vypočítané indexy nejvyšší možné reflexe jsou proto chybné, protože tohle nesplňují.