

Diffrakció

Dr. Szabó Péter János

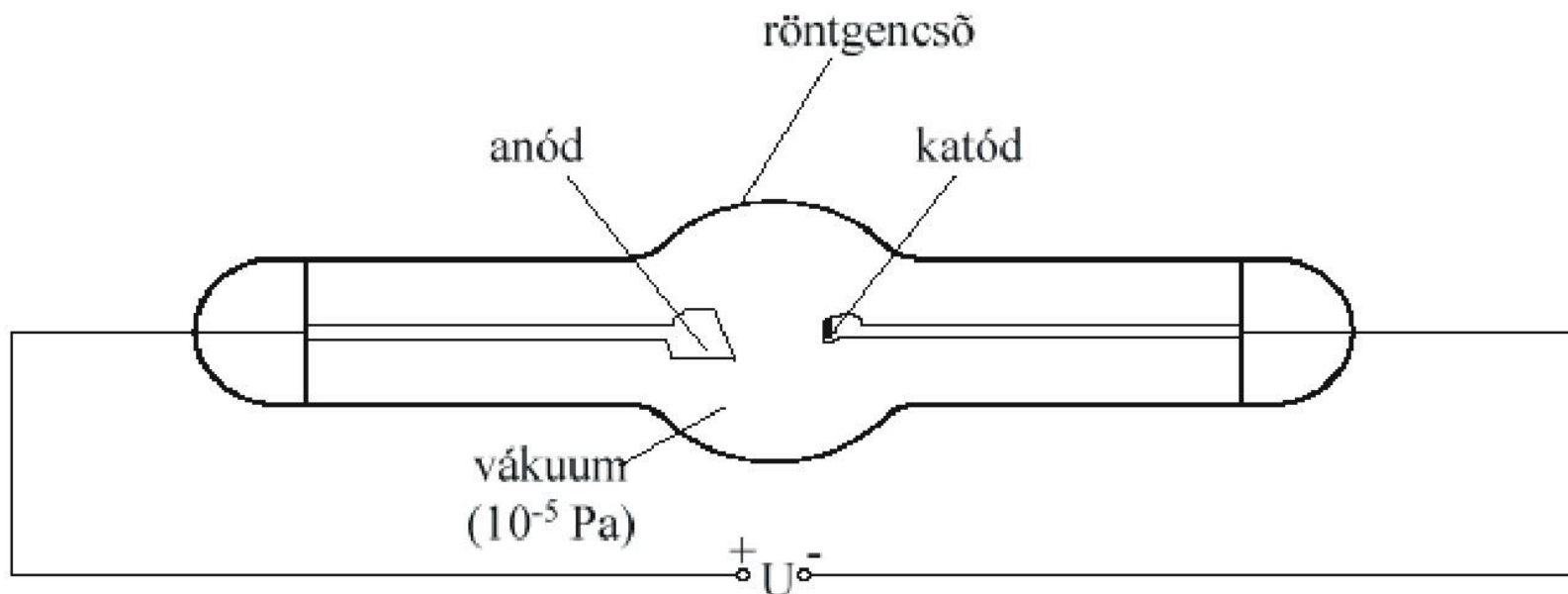
Anyagtudomány és Technológia Tanszék

szpj@eik.bme.hu

Szerkezetvizsgálat szintjei

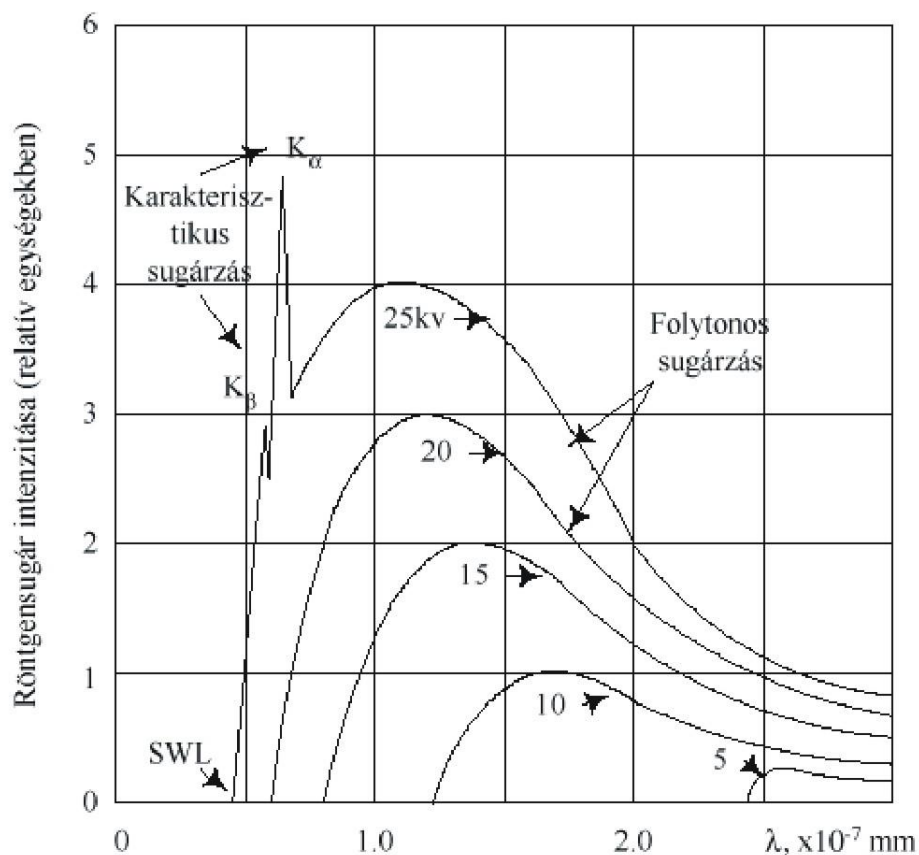
- Atomi elrendeződés vizsgálata (*röntgendiffrakció, transzmissziós elektronmikroszkóp, atomerő-mikroszkóp*)
- Mikroszerkezet vizsgálata (*pásztázó elektronmikroszkóp, röntgenspektroszkópia*)
- Makroszerkezet vizsgálata (*klasszikus metallográfia – „materialográfia”*)

Röntgensugárzás keltése



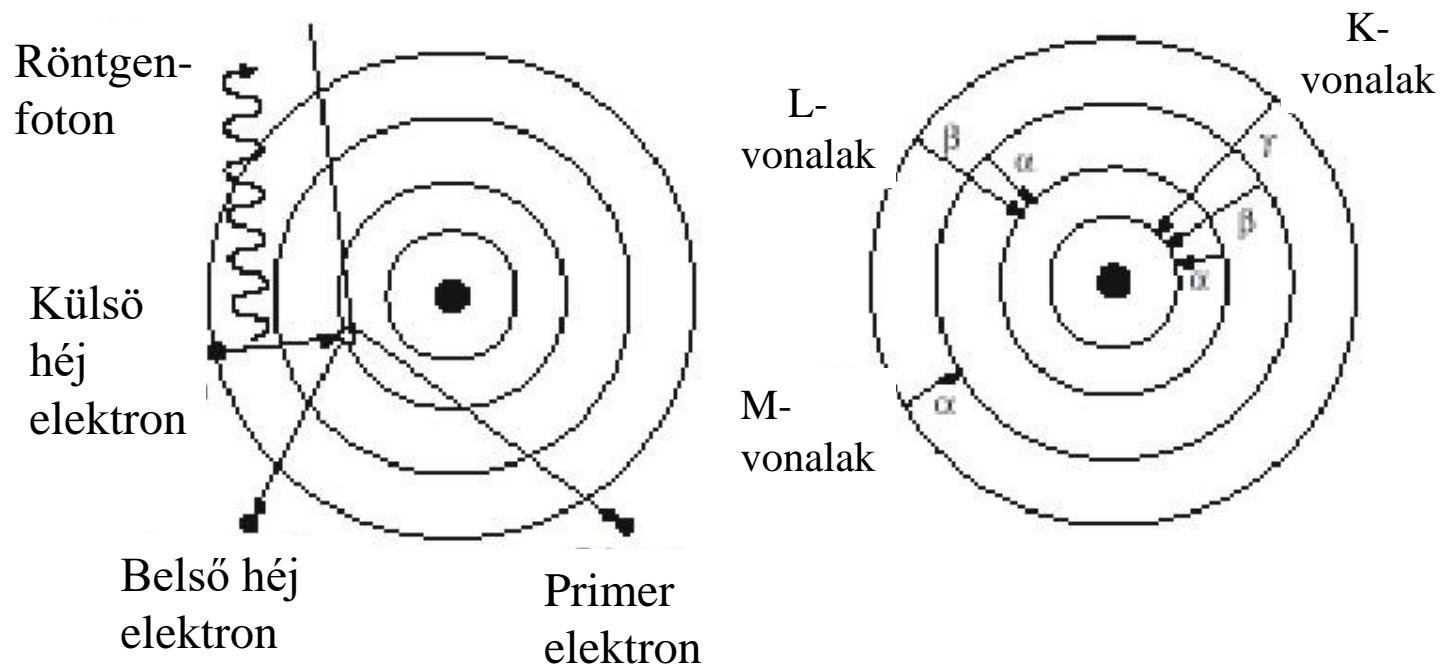
- Izzókatódos röntgenforrás
- 20-40 kV gyorsítófeszültség

Fehér és karakterisztikus röntgensugárzás



Fehér röntgen:
elektronok
fékeződése az atomok
terében.

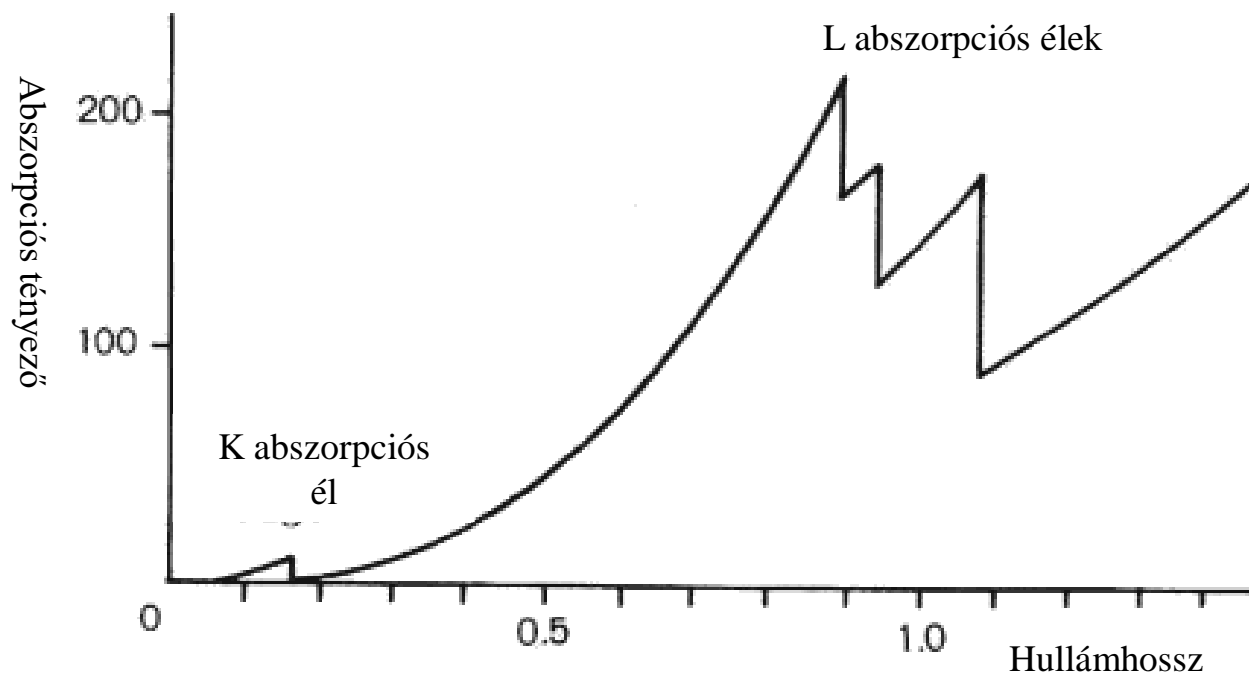
Karakterisztikus röntgensugárzás



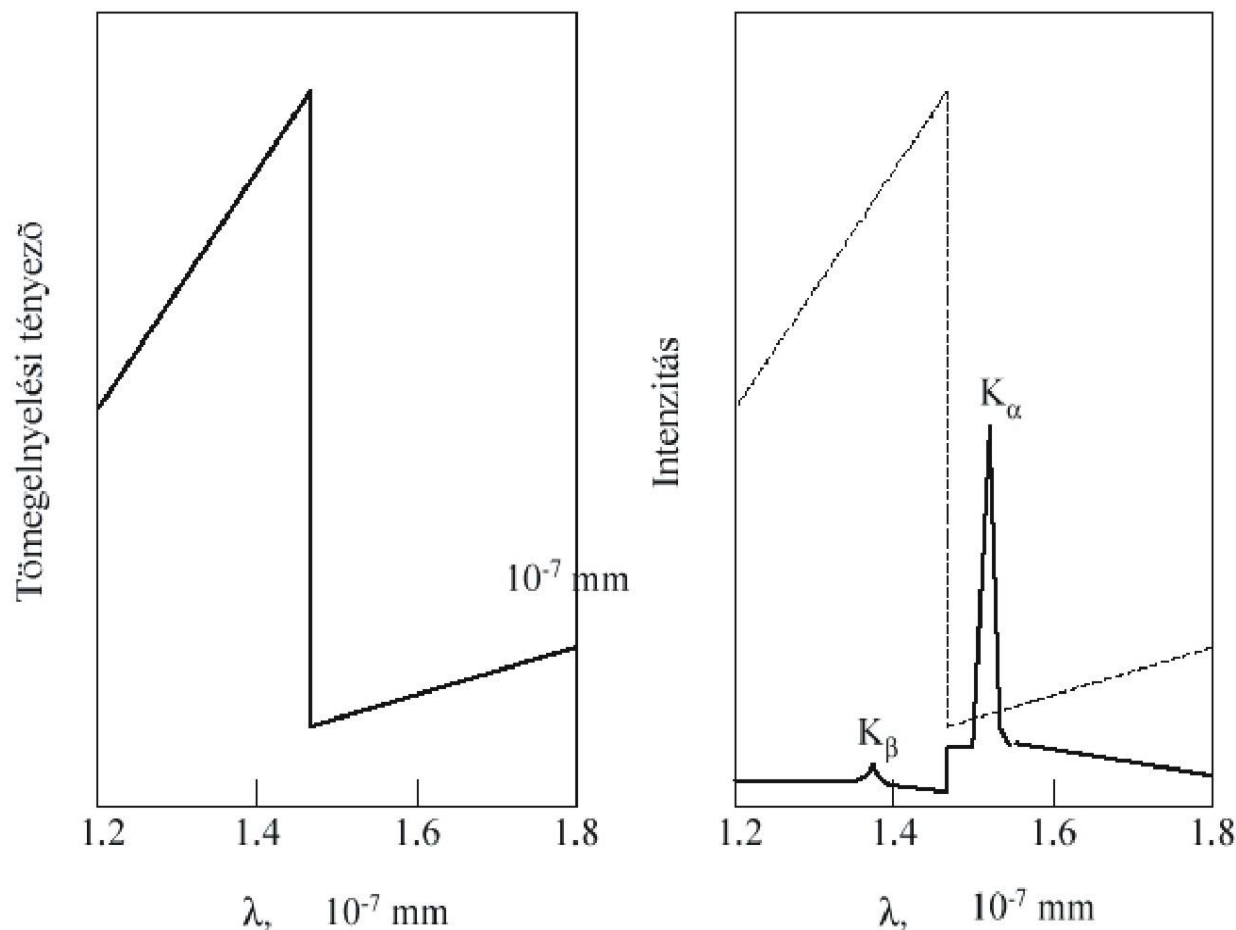
- Belső héj ionozáció
- Rekombinálódást követően röntgenfoton kibocsátás

Röntgensugarak elnyelődése

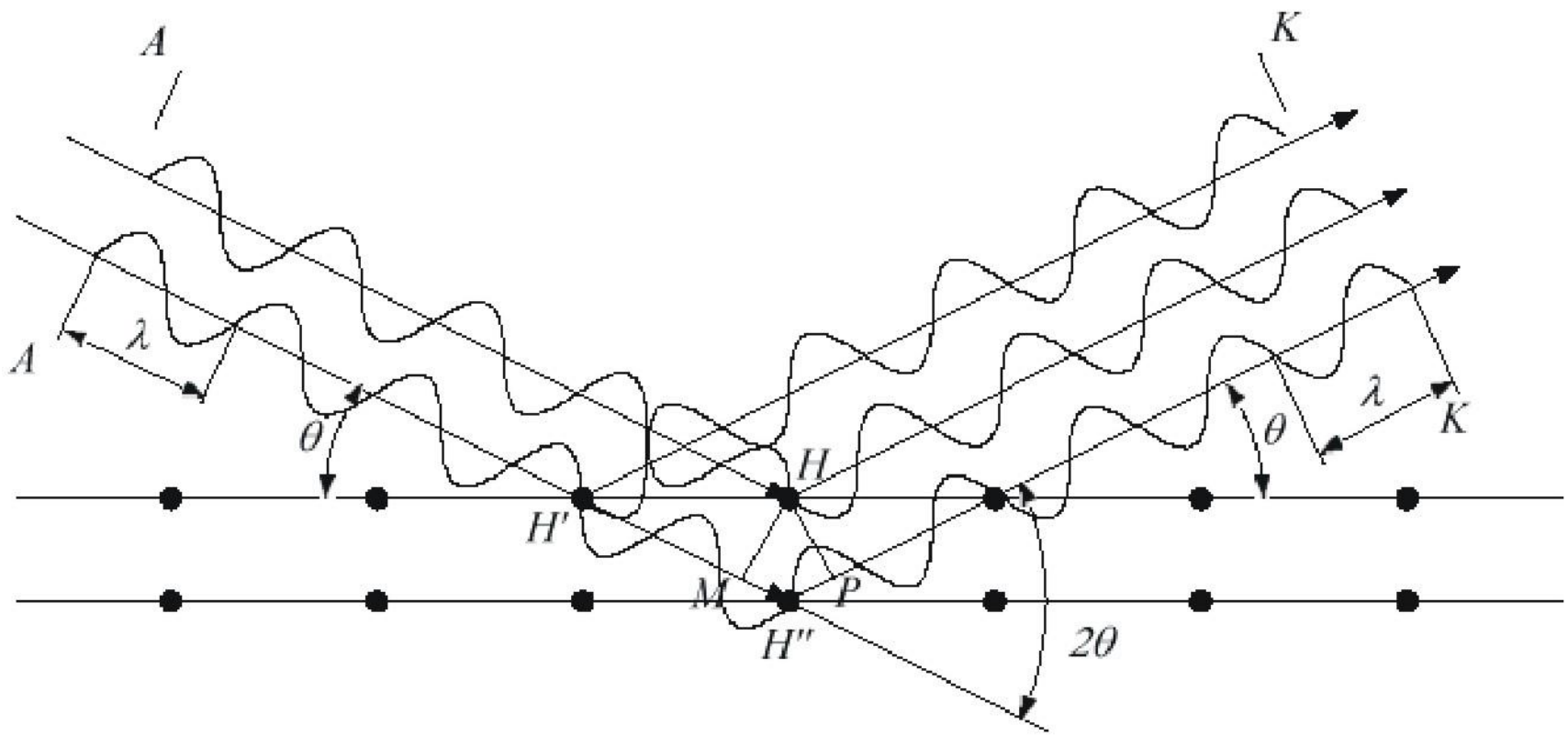
$$I(x) = I_0 e^{-\mu x}$$



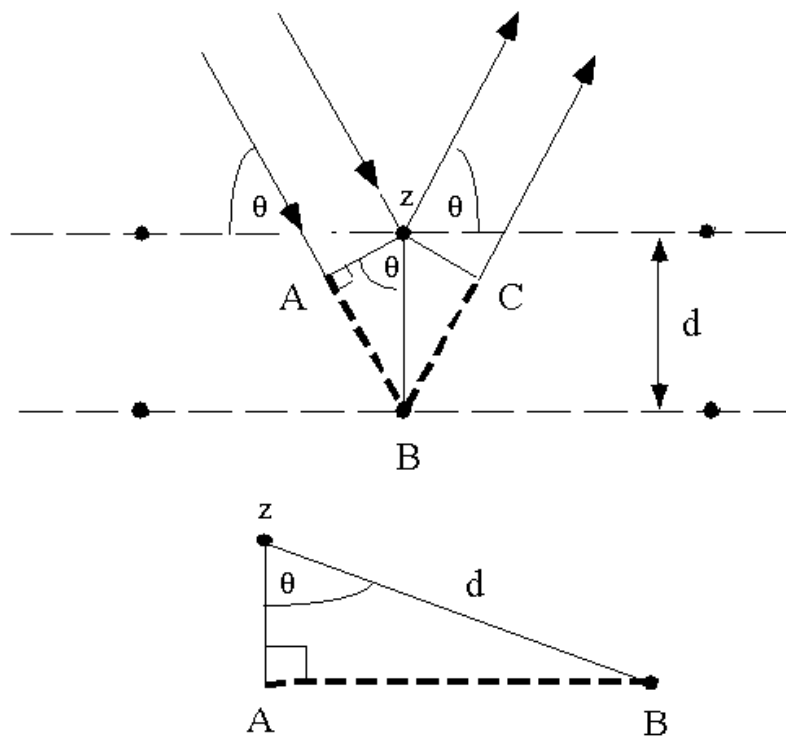
Szűrés, monokromatizálás



Röntgensugarak elhajlása

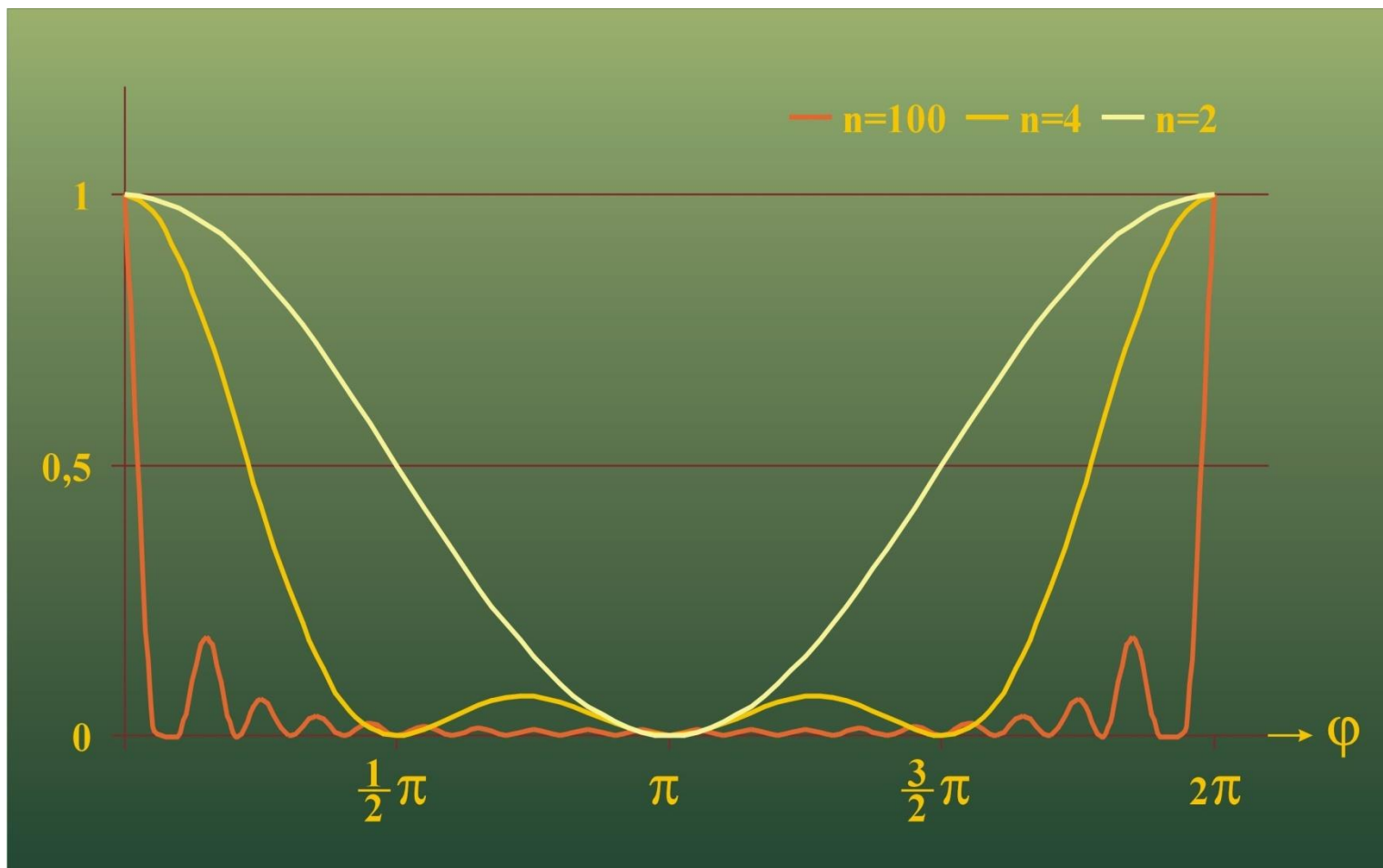


Bragg-egyenlet



$$n\lambda = 2d \sin \Theta$$

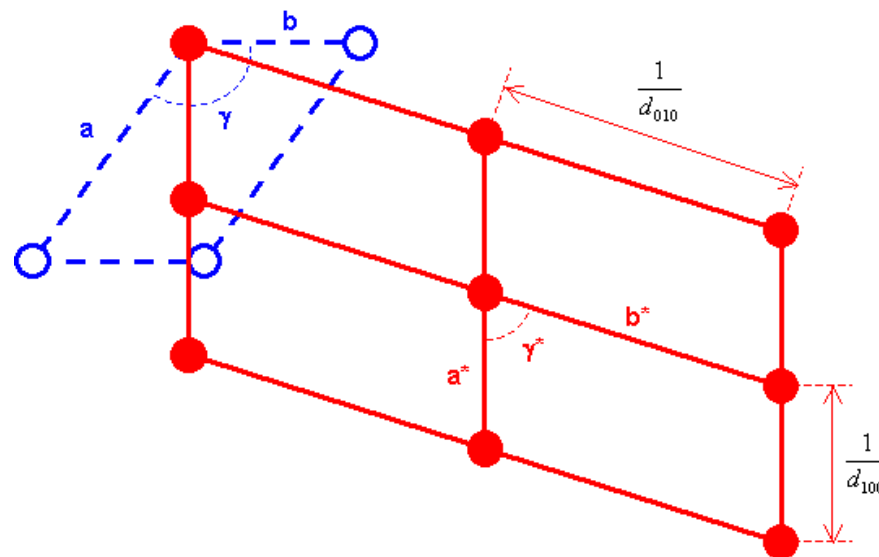
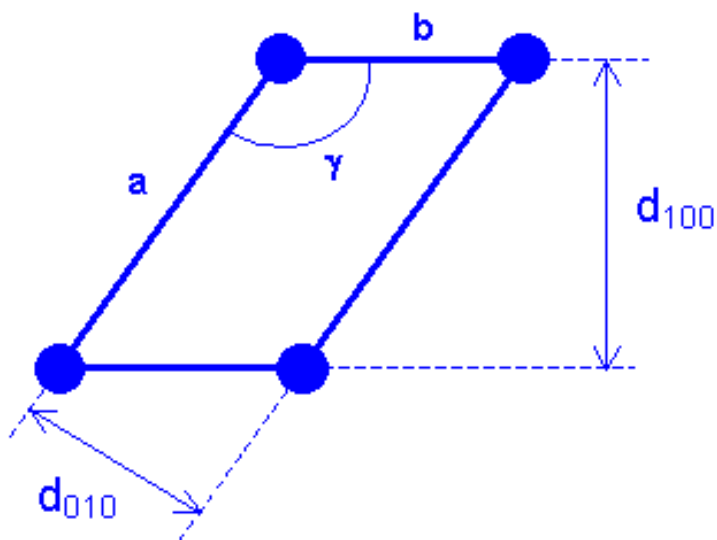
Nagyszámú reflektáló sík



Reciprok rács és diffrakció

A reciprok rács definíciója

- Az eredeti (ún. *direkt rács*) rácssíkjait egy másik rács (a *reciprokrács*) pontjaivá képezzük le.



A bázisvektorok közötti összefüggés

$$\bar{b}_1 = \frac{\bar{a}_2 \times \bar{a}_3}{\bar{a}_1 \bar{a}_2 \bar{a}_3} \quad \bar{b}_2 = \frac{\bar{a}_3 \times \bar{a}_1}{\bar{a}_1 \bar{a}_2 \bar{a}_3} \quad \bar{b}_3 = \frac{\bar{a}_1 \times \bar{a}_2}{\bar{a}_1 \bar{a}_2 \bar{a}_3}$$

ahol

a_1 , a_2 és a_3 a direkt rács bázisvektorai,

b_1 , b_2 és b_3 a reciprok rács bázisvektorai

Reciprok rácsvektor

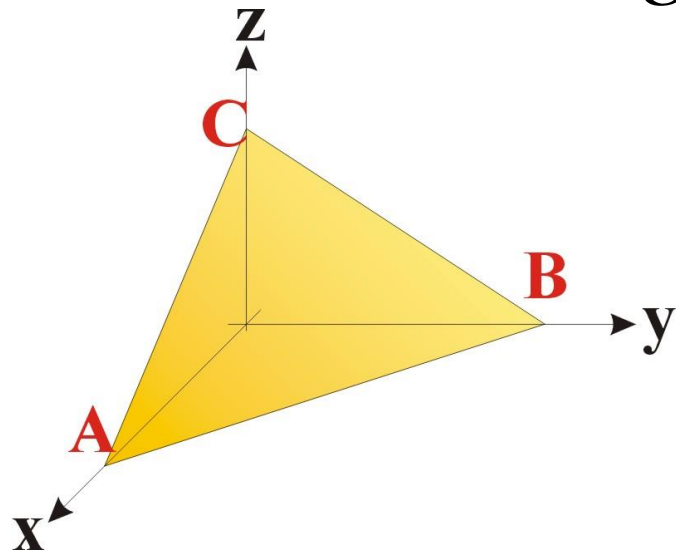
Fontos: $\bar{a}_i \cdot \bar{b}_i = 1$ és $\bar{a}_i \cdot \bar{b}_j = 0$

Rácsvektor a reciprok térben:

$$(hkl) \Rightarrow \bar{g} = h\bar{b}_1 + k\bar{b}_2 + l\bar{b}_3$$

vagyis az a_1, a_2, a_3 bázisvektorokkal megadott direkt rács egy (hkl) síkját a b_1, b_2, b_3 bázisvektorokkal megadott reciprokrács egy pontjába (a g -vektor végpontjába) képezi le.

$$\vec{g} \perp (hkl)$$



$$h' = 1/A$$

$$k' = 1/B$$

$$l' = 1/C$$

$$h = h' \cdot n$$

$$k = k' \cdot n$$

$$l = l' \cdot n$$

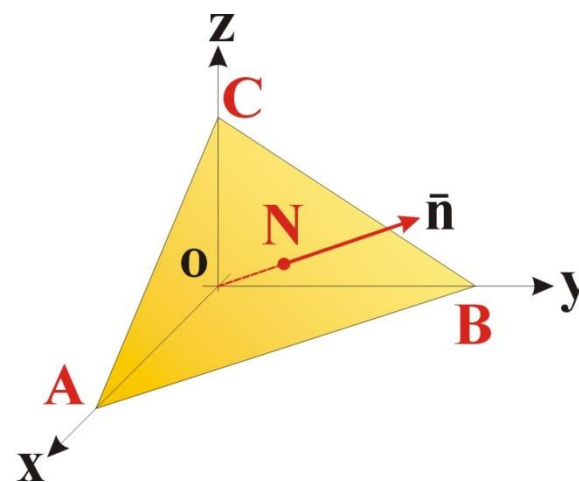
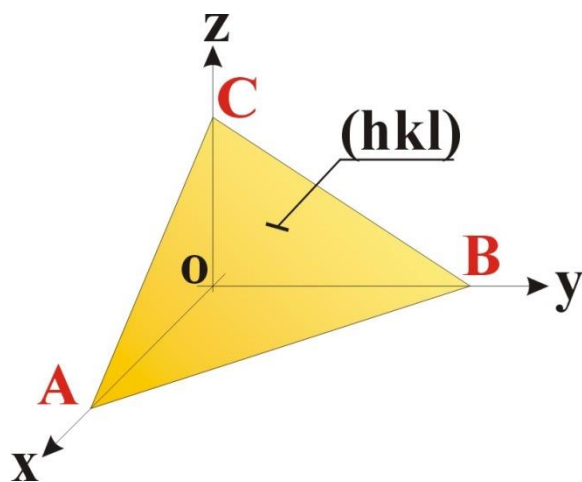
$$\vec{g} = hb_1 + kb_2 + lb_3 \quad \text{és} \quad \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 0$$

$$\vec{g} \cdot \overline{AB} = \vec{g}(\overline{OB} - \overline{OA}) = \vec{g}\left(\frac{\vec{a}_2}{k} - \frac{\vec{a}_1}{h}\right) = -\frac{h}{h} + \frac{k}{k} = 0$$

Vagyis a g és a sík egy vektora merőleges egymásra

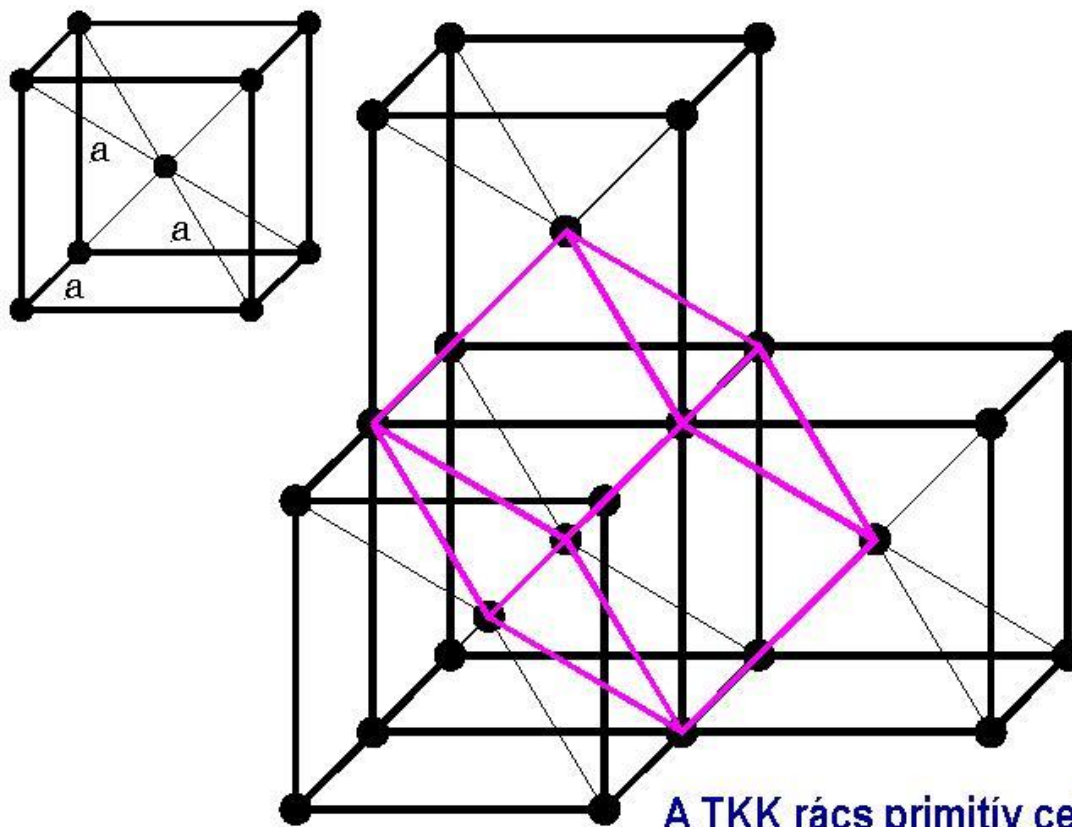
$$|\vec{g}| = \frac{1}{d},$$

ahol d a (hkl) síksorozat tagjai közti távolság



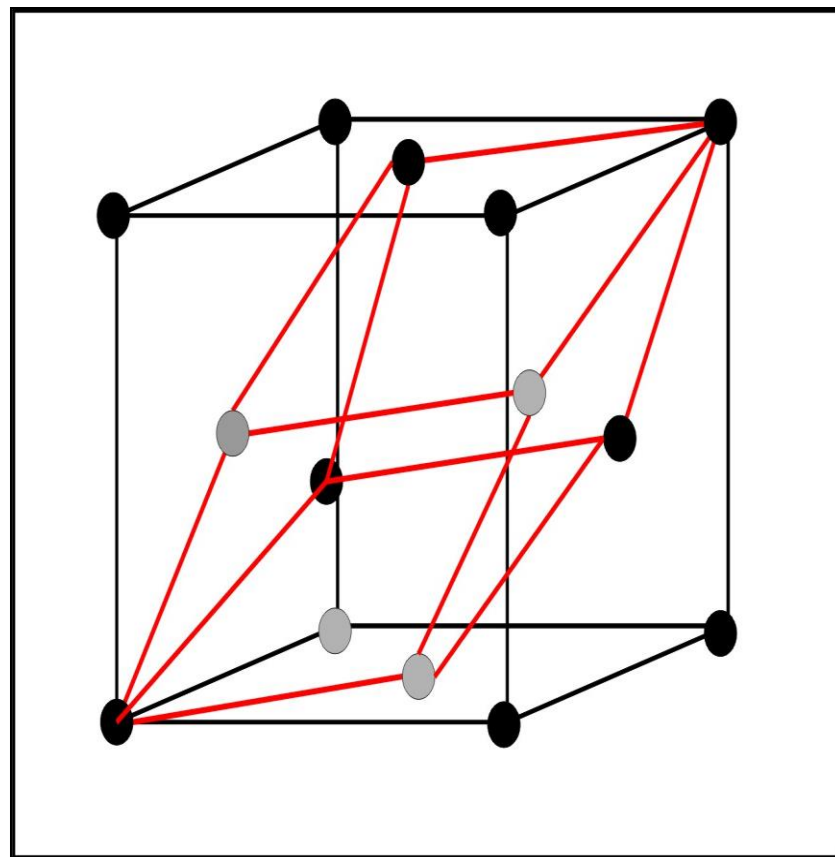
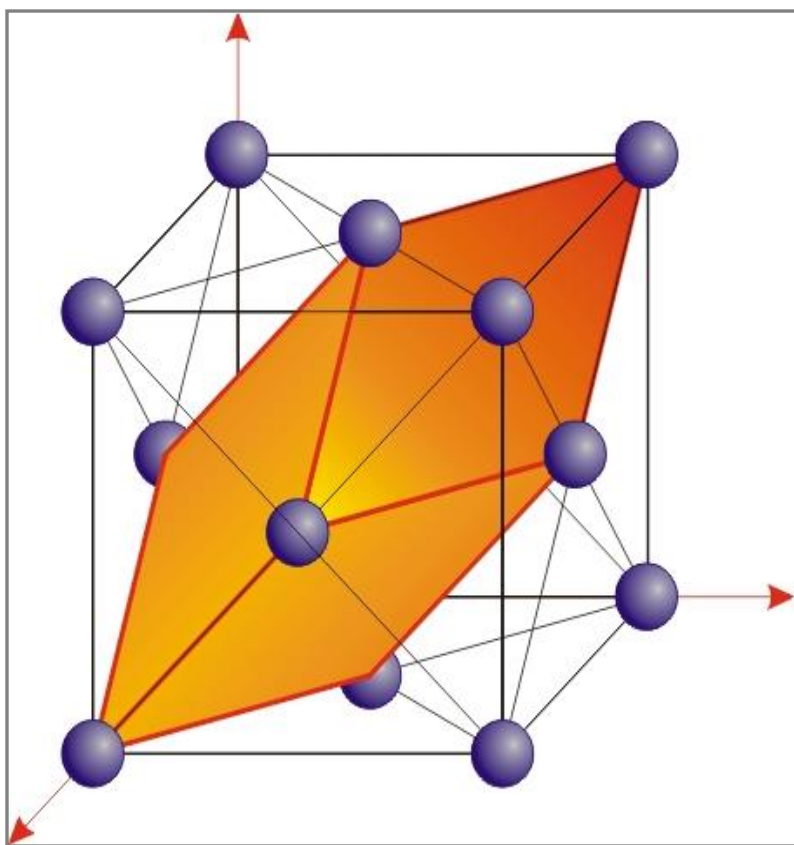
A rajzon az egyik sík az ABC-sík, a másik a vele párhuzamos, az origón áthaladó sík.

Rácsszerkezet megmaradása

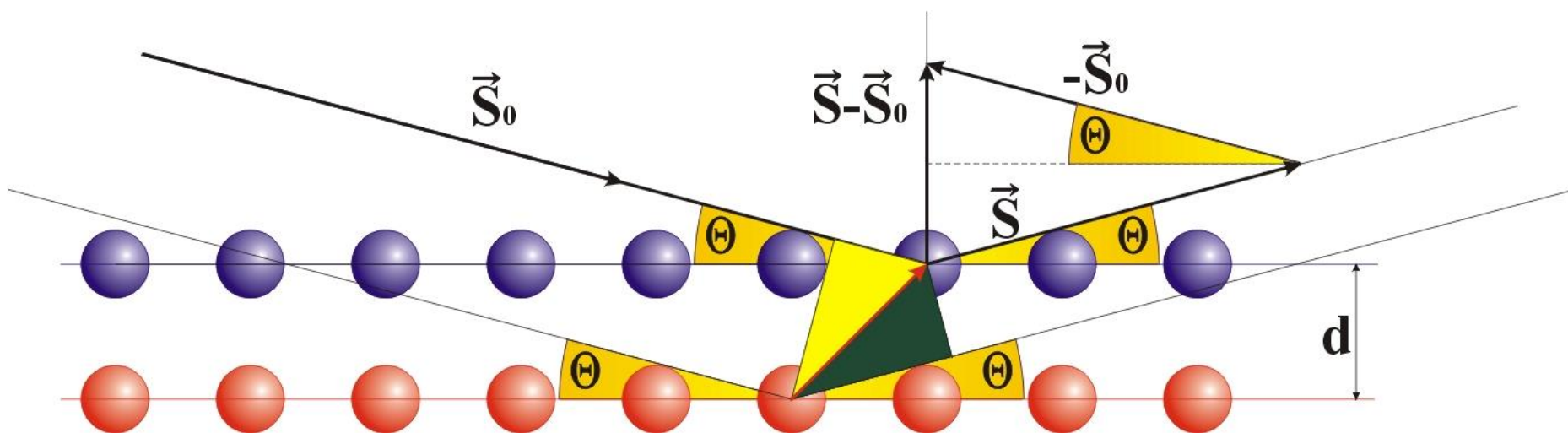


A TKK rács primitív cellája

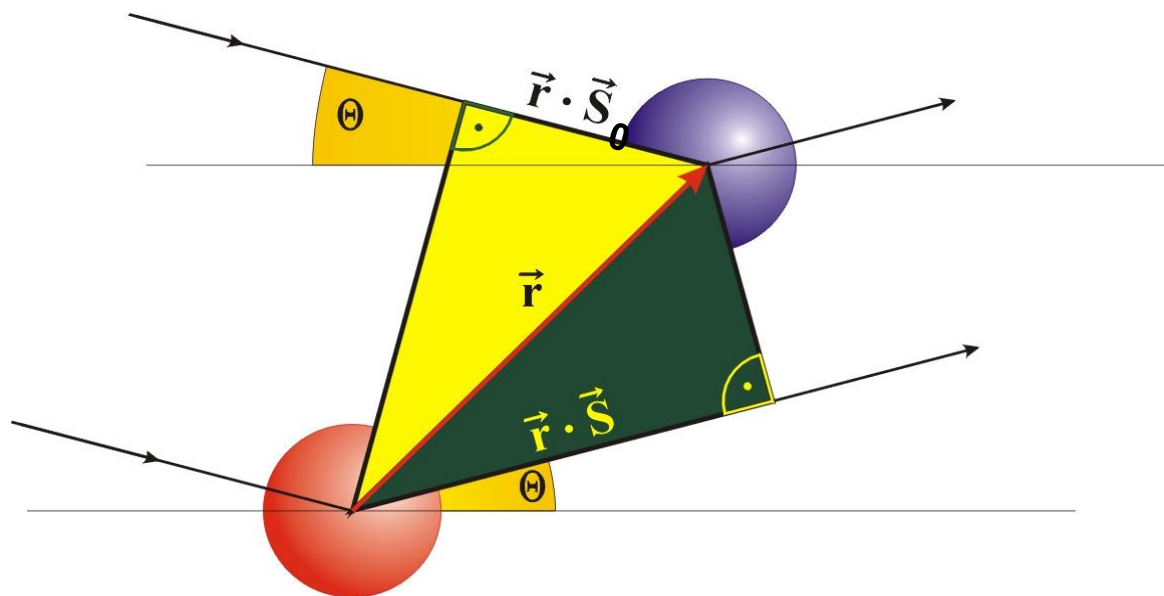
Rácsszerkezet megmaradása



Diffrakció másképpen

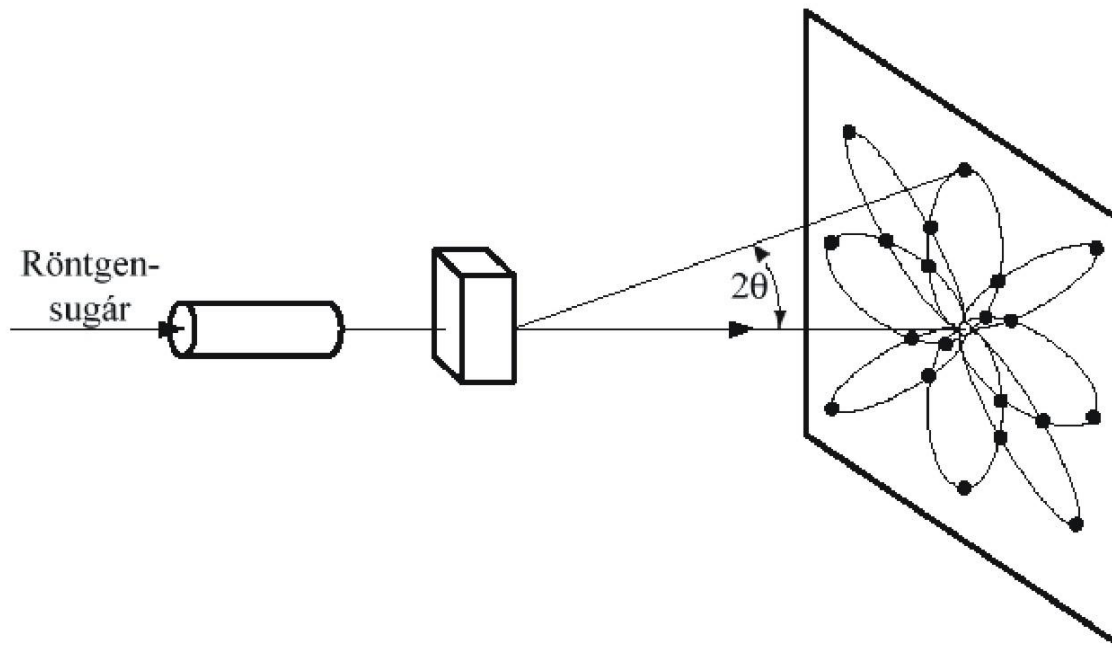


Diffrakció másképpen



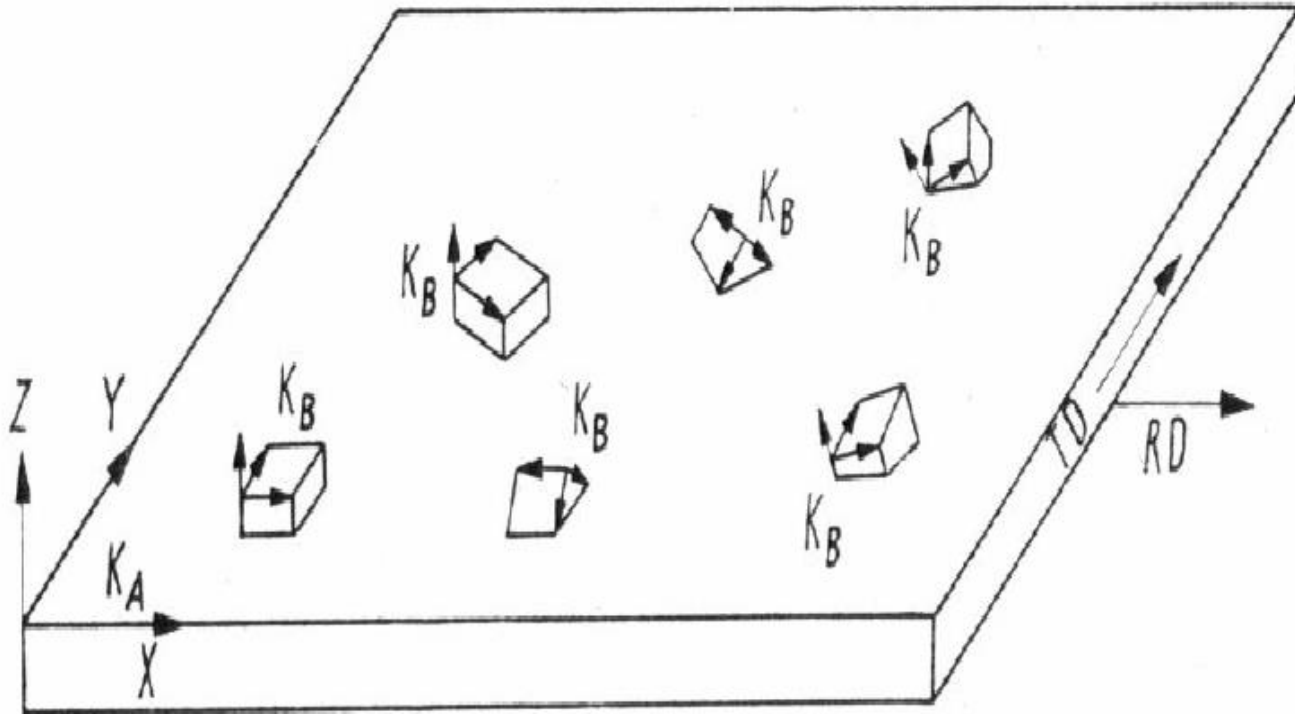
Szisztematikus kioltás

Laue-módszer

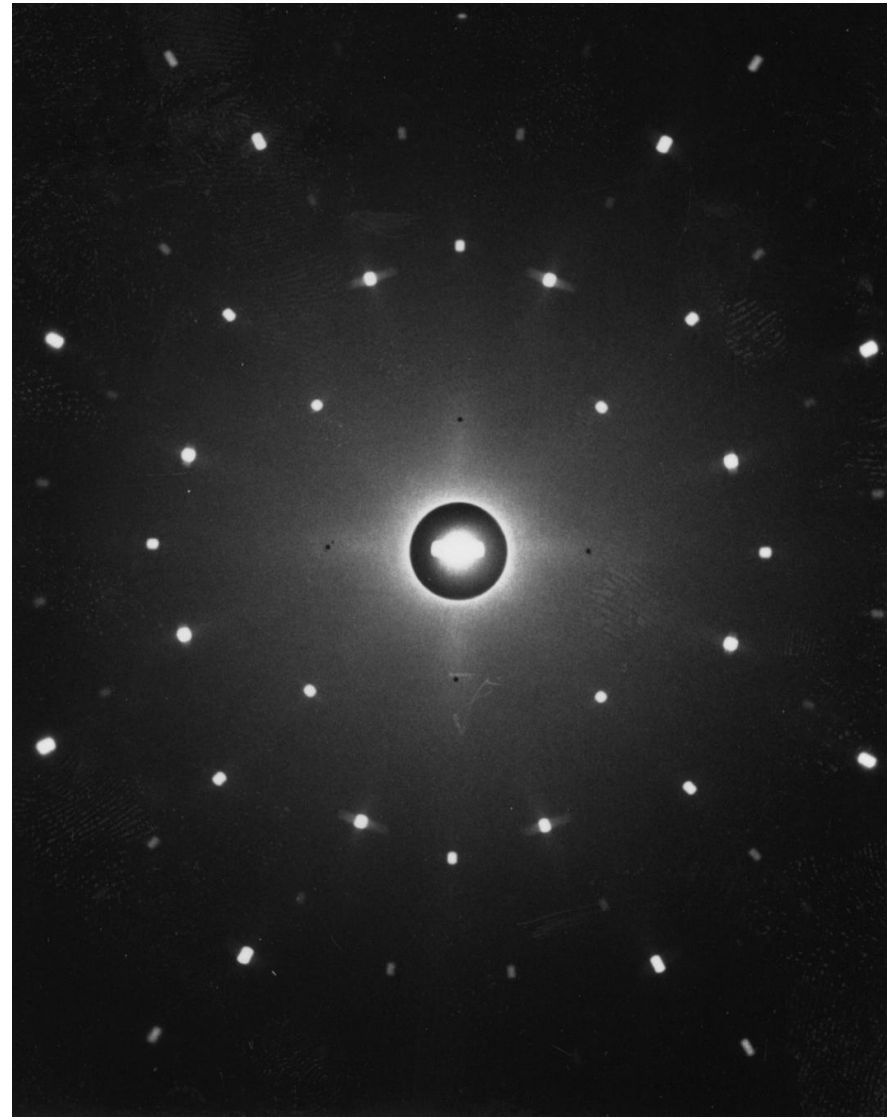


- fehér röntgensugárzás
- egykristály minta
- orientáció meghatározás

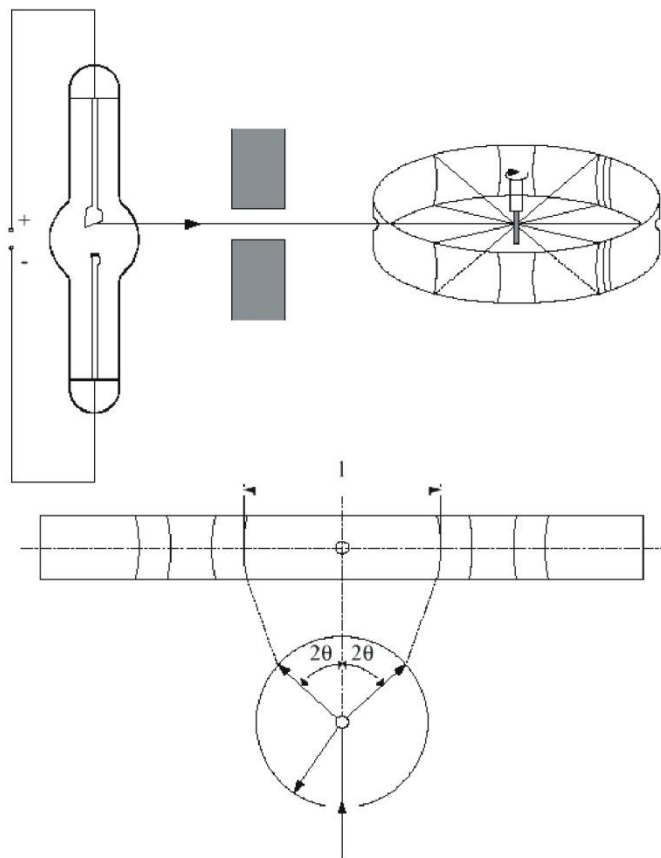
Orientáció



Si egykristály Laue-képe

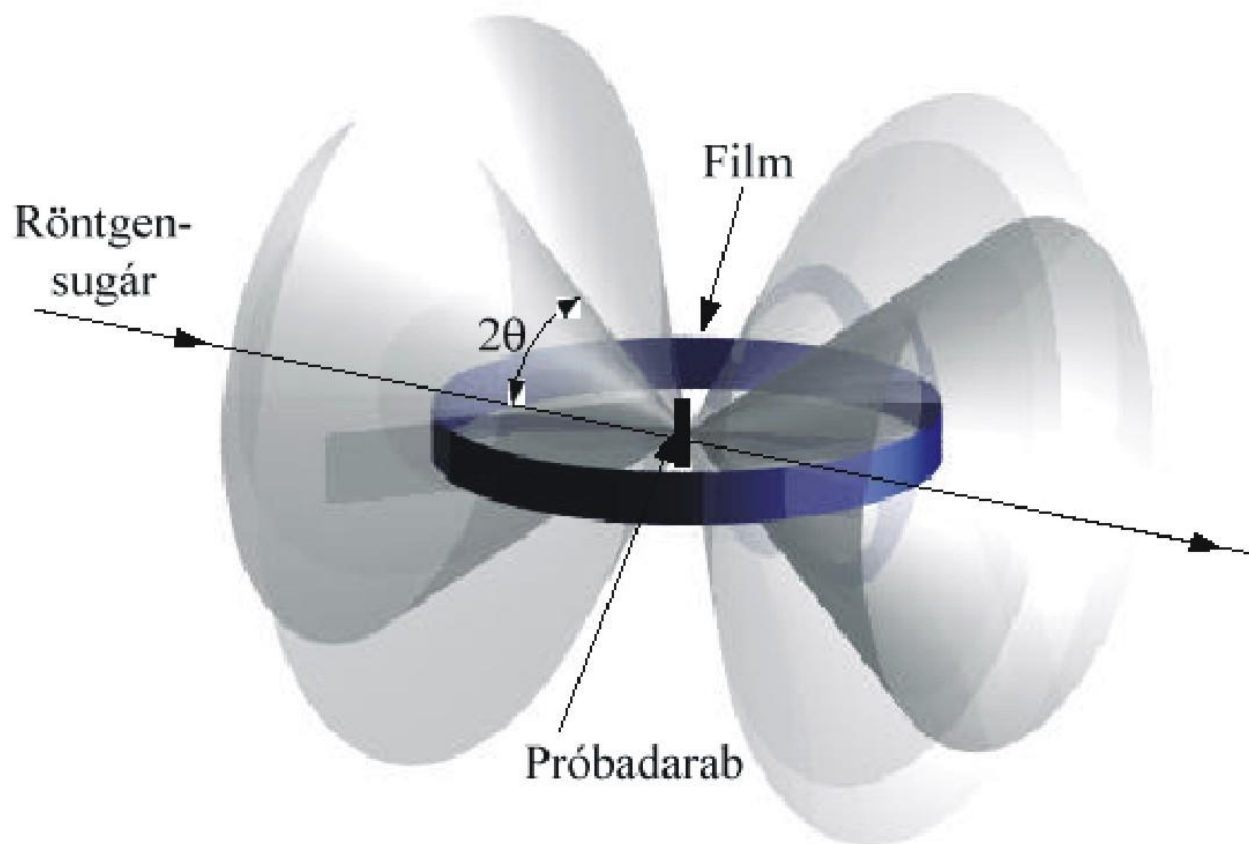


Debye-Scherrer módszer

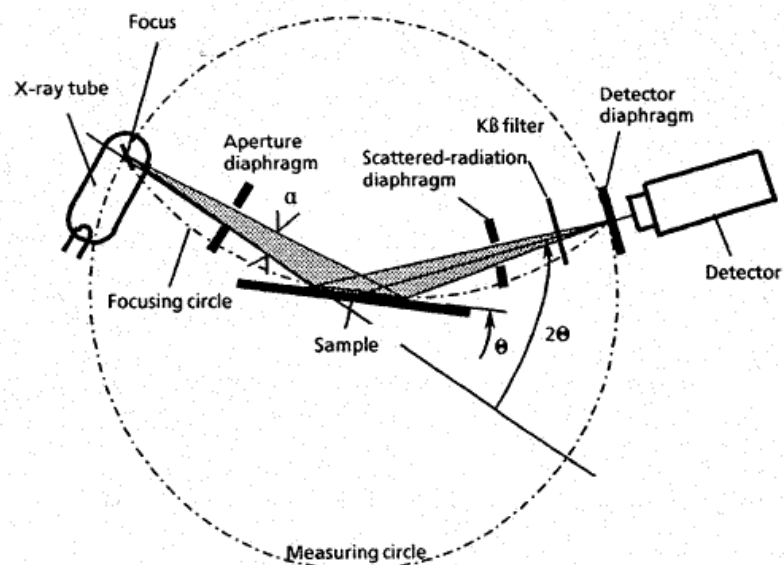


- monokromatikus röntgensugárzás
- porminta
- fázisanalízis
- rácsállandó meghatározása

Diffrakciós kúpok kialakulása



Diffraktométer

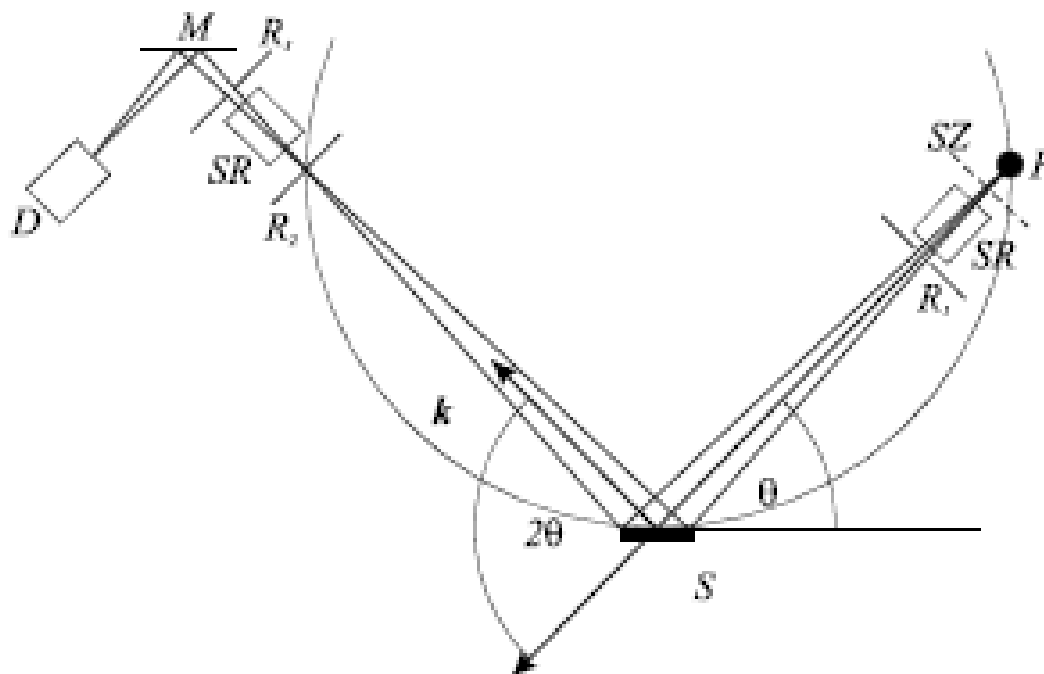


- θ Glancing angle
- 2θ Diffraction angle
- α Aperture angle



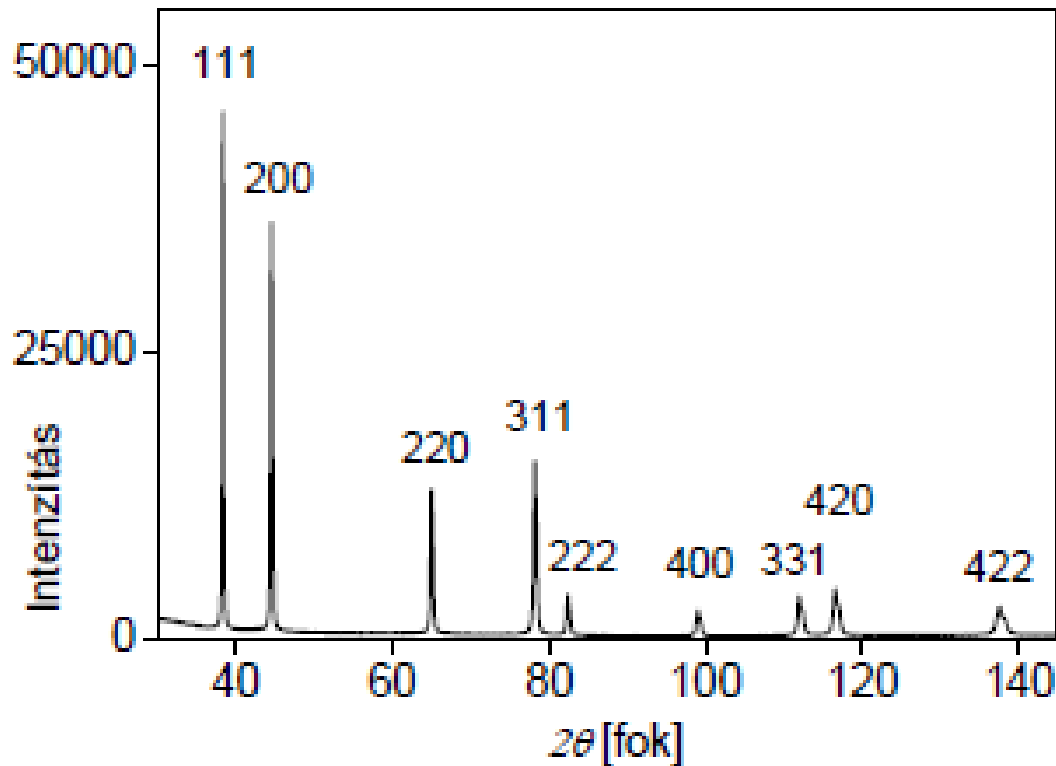
$$\Theta - \Theta, \quad \Theta - 2\Theta$$

Diffraktométer



A por diffraktométer felépítése. F – röntgen sugárforrás, SZ – szűrő, SR – Soller-rés, S – minta, R_1, R_2, R_3 – rések, M – monokromátor, D – detektor

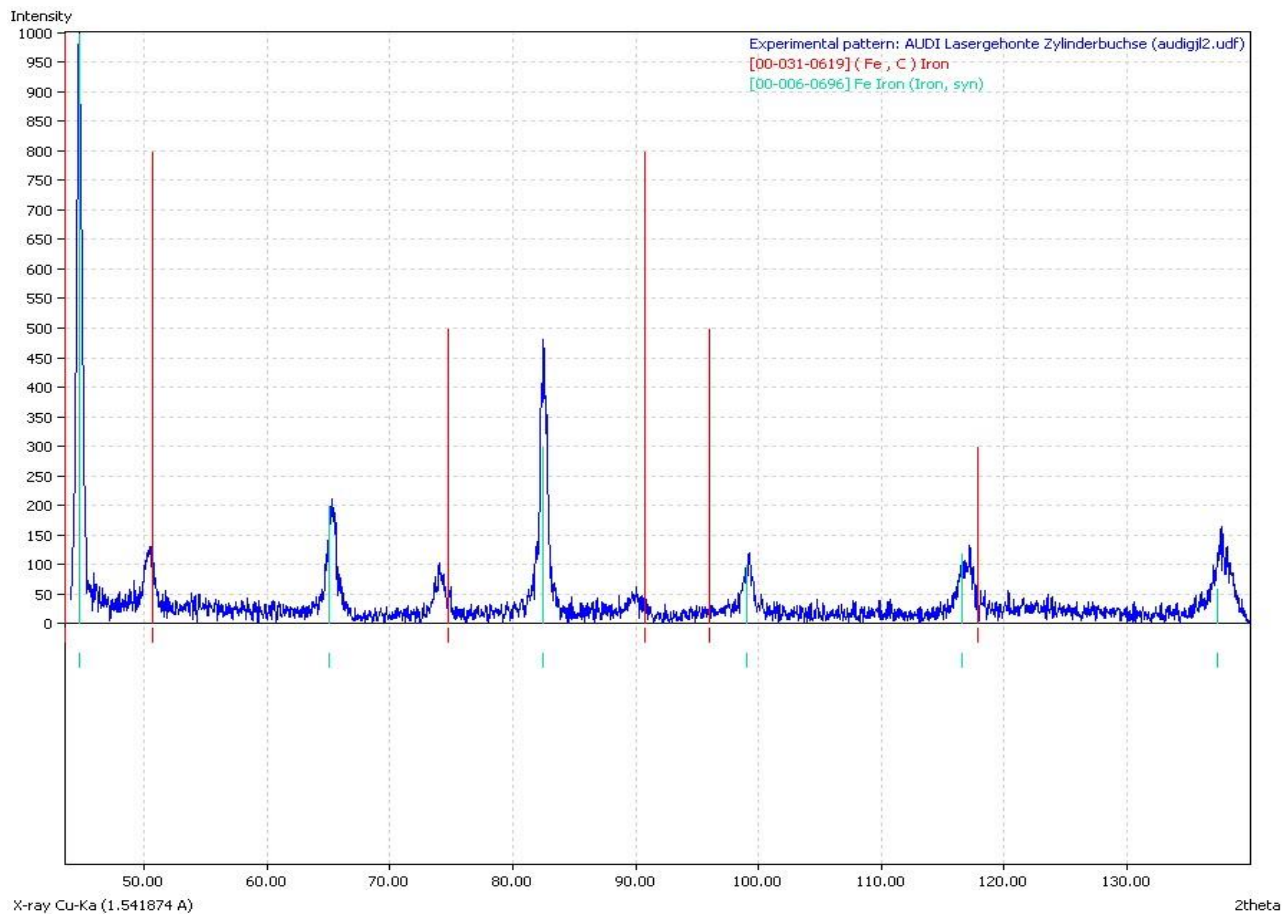
Diffraktogram



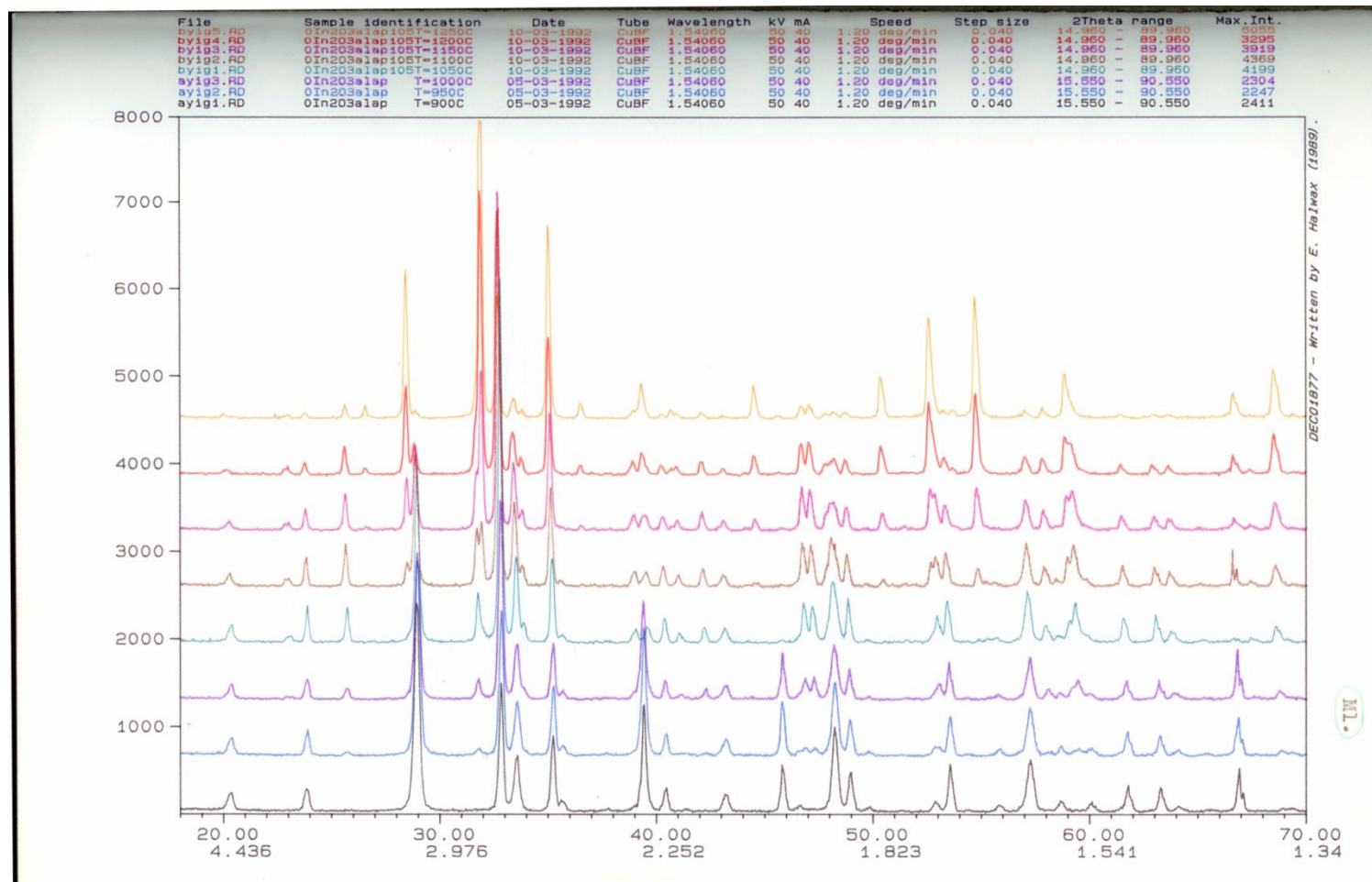
Diffraktogram kiértékelése

- ASTM (JCPDS) kartotékkrendszer
- ~250 000 kristályos fázis adatai
- A kártya tartalmazza a fázis tulajdonságait, a mért csúcsok indexelését és azok egymáshoz viszonyított intenzitását
- Számítógéppel segített azonosítás

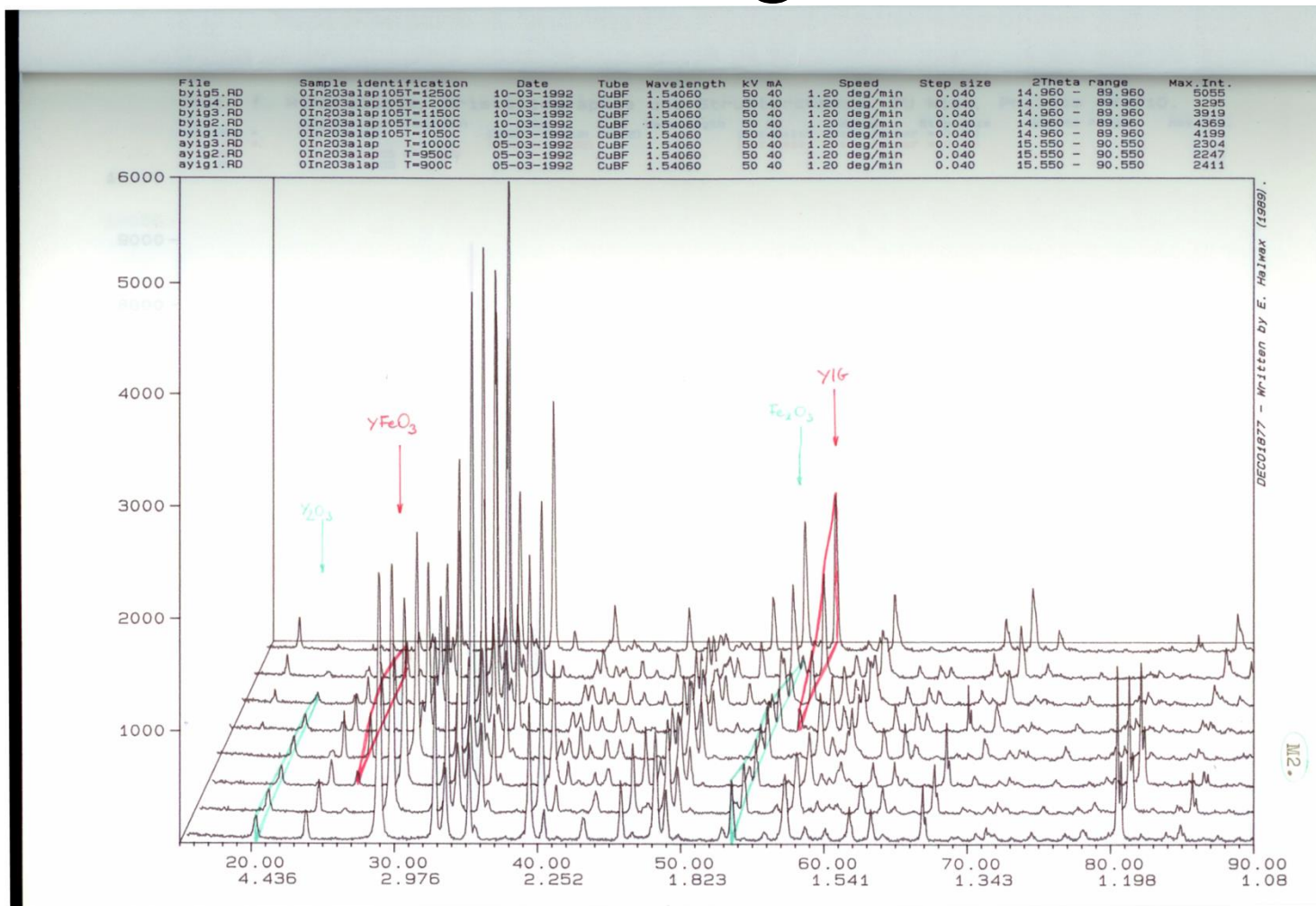
Diffraktogram



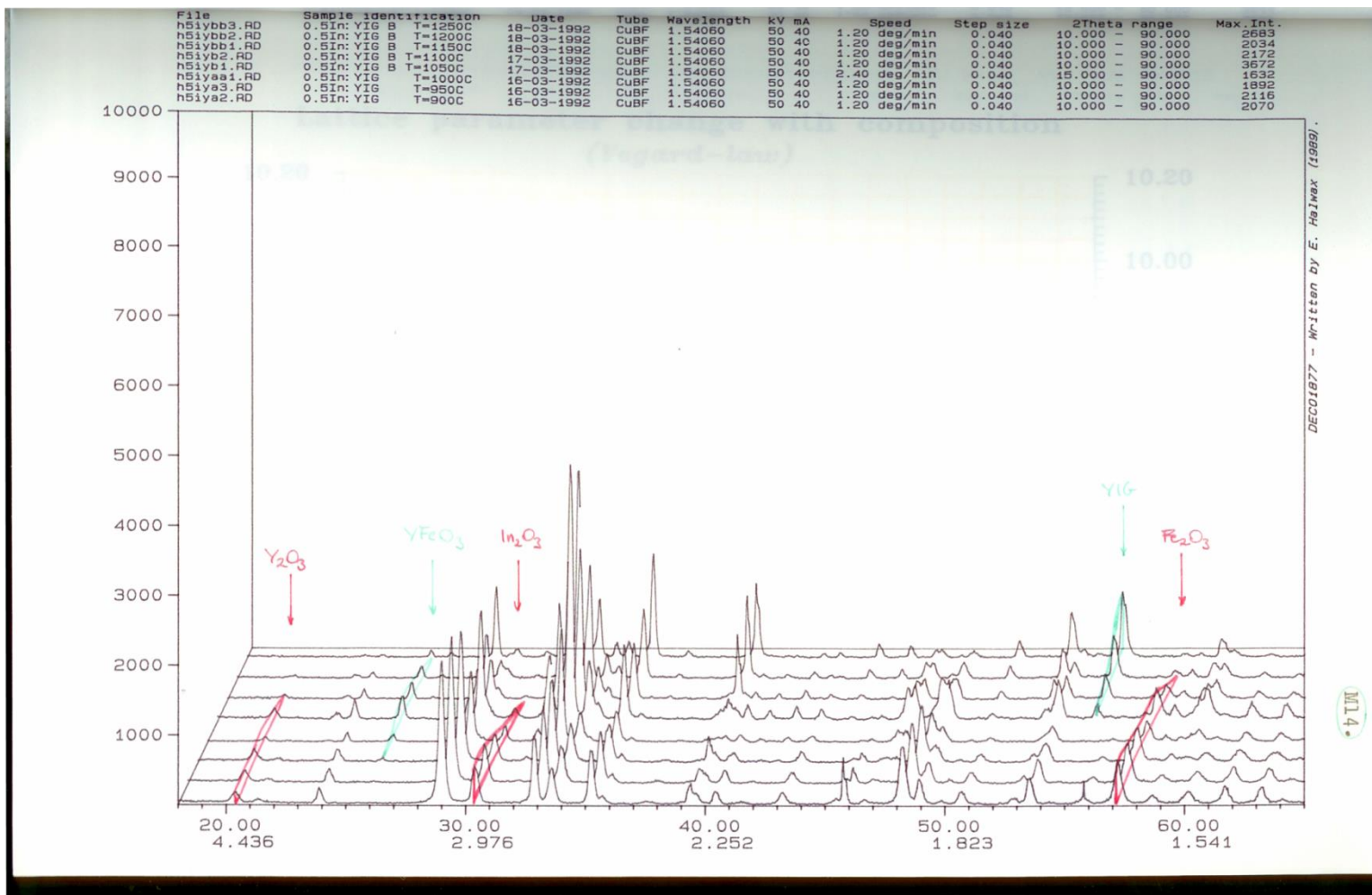
Diffraktogram



Diffraktogram



Diffraktogram



Indexelés

$$\lambda_{K\alpha} = \frac{2\lambda_{K\alpha_1} + \lambda_{K\alpha_2}}{3} \qquad 2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$$

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

Mivel a h , k és l egész számok, ezért az $1/d_{hkl}^2$ értékek az $1/a^2$ egész számszorosaként állnak elő, ahol a szorzótényező az $N = h^2 + k^2 + l^2$.

N	hkl	egyszerű kübös	tércentrált kübös	lapcentrált kübös	gyémánt
1	100	x			
2	110	x	x		
3	111	x		x	x
4	200	x	x	x	
5	210	x			
6	211	x	x		
(7)					
8	220	x	x	x	x
9	300, 221	x			
10	310	x	x		
11	311	x		x	x
12	222	x	x	x	
13	320	x			
14	321	x	x		
(15)					
16	400	x	x	x	x
17	410, 322	x			
18	411, 330	x	x		
19	331	x		x	x
20	420	x	x	x	
21	421	x			
22	332	x	x		
(23)					
24	422	x	x	x	x

Indexelés

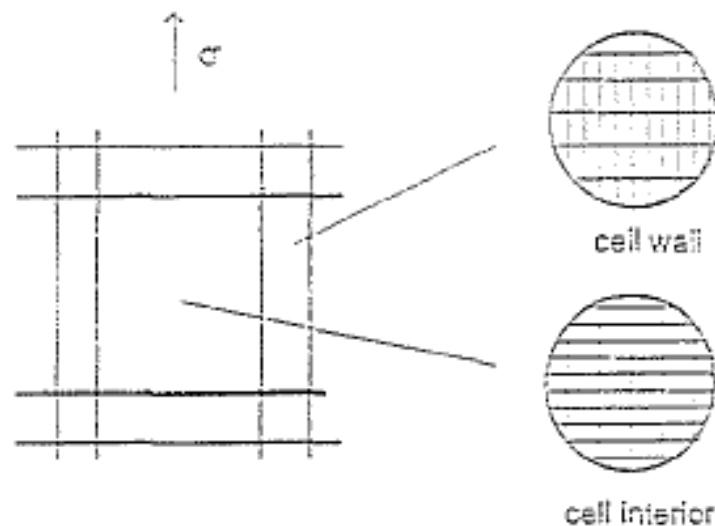
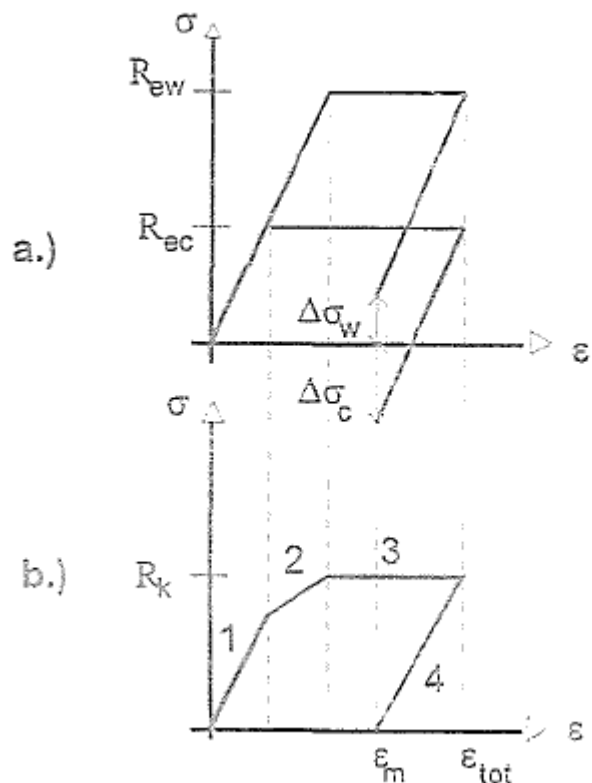
Egyéb alkalmazások

- Szemcseméret

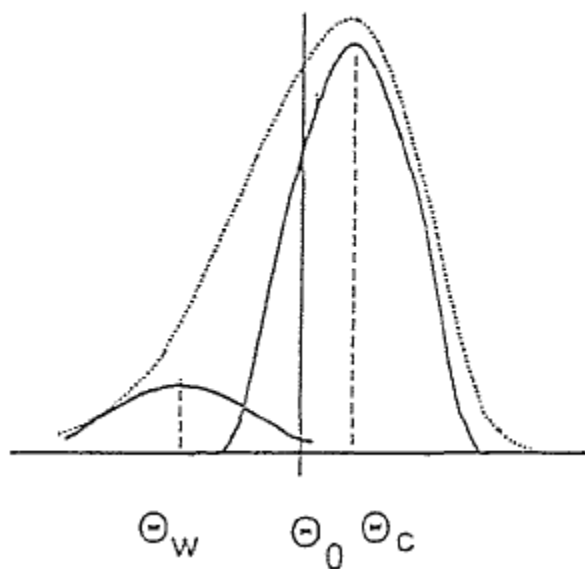
$$\beta_f = \sqrt{\beta^2 - \beta_i^2} \quad \langle x \rangle_{vol} = \frac{4\lambda}{3\beta_f \cos \theta}$$

- Rugalmas rácstorzulás
 - ötvözőkoncentráció
- Diszlokációs szerkezet
 - Vonalprofil-analízis

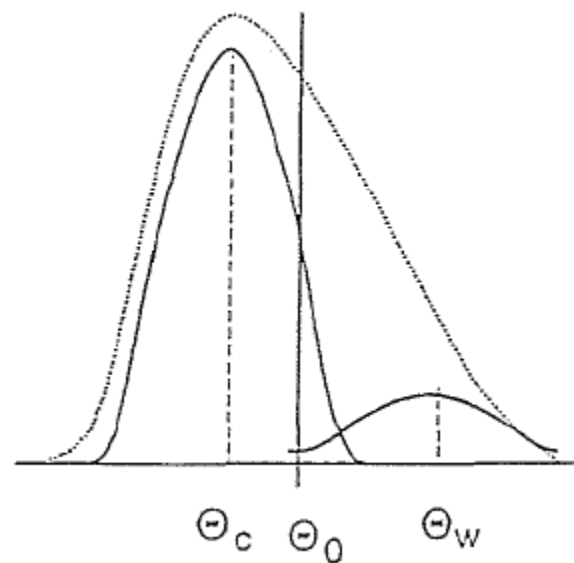
Diszlokációszerkezet kvázi-kompozit modellje



Aszimmetrikus vonalprofil



Axiális nézet



Oldalnézet

Aszimmetrikus vonalprofil

