

Rentgenová difrakce

M. Malík

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Břehová 7, 115 19 Praha 1

malikmi3@fjfi.cvut.cz

Abstrakt

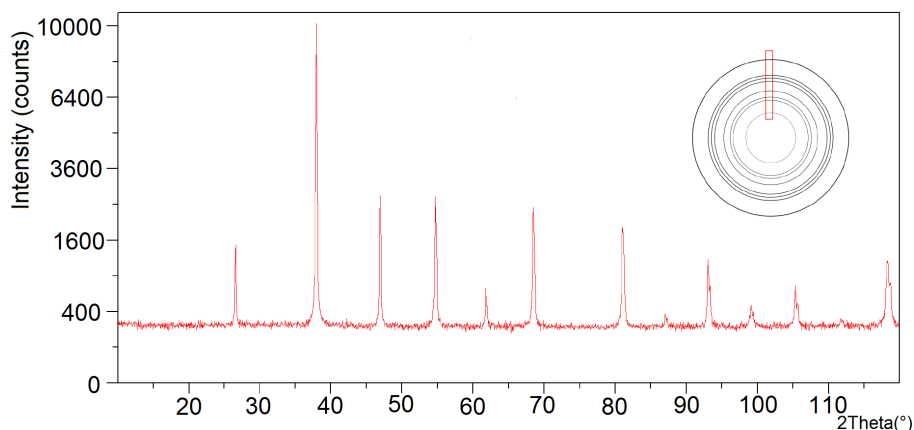
Rentgenová difrakce se používá při zjištění struktury krystalických látek. My jsme rentgenovou difrakci použili k vyšetření látky EuTiO_3 . Cílem této práce bylo zjištění elementární buňky a polohu atomů v ní.

1 Úvod

Rentgenová difrakce je založena na objevu německého fyzika Maxe Theodora Felixe von Laue. Ten v roce 1914 objevil difrakci rentgenových paprsků na krystalech a obdržel Nobelovu cenu za fyziku. Rentgenová difrakce má nedestruktivní charakter a lze s ní měřit povrch látky do hloubky v řádu mikrometrů.

2 Teorie

Lampa difraktoměru vyšle rentgenové paprsky určité vlnové délky z dostatečné vzdálenosti na to, aby se nám jevíli jako rovnoběžné. Tyto paprsky difraktují na atomech látky a interagují mezi sebou konstruktivně a destruktivně. Část difraktovaných paprsků dopadne na snímač. Difraktoměr měří intenzitu, tj. počet fotonů dopadlých na snímač, v závislosti na úhlu mezi lampou a povrchem látky a vykreslí je do difrakčního záznamu.



Obr. 1: Difrakční záznam

Z Braggovy podmínky

$$2d \sin \theta = \lambda, \quad (1)$$

kteřá udává vztah mezi vlnovou délkou λ , úhlem θ mezi paprsky a rovinou zkoumané látky a vzdálenost d mezi rovinami hkl , jsme schopni tuto vzdálenost vypočítat.

Z rozložení peaků na Obr.1 lze předpokládat, že zkoumaná látka bude mít kubickou primitivní buňku. Můžeme tedy pomocí rovnice

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

určit stranu elementární buňky a . Tento vztah funguje pouze pro kubické buňky. Pokud by naše elementární buňka odpovídala jiným Bravaisovým mřížkám, pak bychom tento vztah nemohli použít.

Nyní je zapotřebí určit polohy atomů v elementární buňce. Z velikosti strany kubické elementární buňky jsme schopni vypočítat její objem a ze znalosti atomových hmotností prvků a hustoty látky jsme schopni určit kolik molekul zjišťované látky připadne na jednu elementární buňku. Z této znalosti a charakteru elementární buňky lze v krystalografických tabulkách vyhledat několik možných konfigurací. Krystalické látky mají tendenci být co nejvíce symetrické, takže pokud se na konci dobereme ke dvěma možnými konfiguracemi, ta který bude mít větší symetrii bude mít větší pravděpodobnost výskytu.

Pro výběr možnosti využijeme intenzitu, kterou jsme získali z difrakčního záznamu. Nejdříve ale potřebujeme vypočítat strukturní amplitudu F_{hkl} .

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^n g_j t_j(s) f_j(s) \exp(2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)), \quad (3)$$

kde g_j je okupační faktor, $t_j(s)$ je teplotní faktor, $f_j(s)$ amplituda vlny, h, k, l indexy roviny hkl a x, y, z souřadnice atomu zjištěné z krystalografických tabulek. Strukturní amplitudu sčítáme přes všechny atomy v elementární buňce. Teplotní faktor a amplituda vlny jsou funkce proměnné $s = \frac{\sin \theta}{\lambda}$. V teplotním faktoru, který se vypočítá jako

$$t_j = \exp\left(-B_j \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}\right) \quad (4)$$

vystupuje faktor B , u kterého budeme zjišťovat jeho nejlepší hodnotu. Nyní můžeme vypočítat intenzitu I_{hkl} .

$$I_{hkl} = K p_{hkl} L P_{\theta} T_{hkl} E_{hkl} |F_{hkl}|^2, \quad (5)$$

kde K je škálovací faktor, p_{hkl} je orientační faktor, $L P_{\theta}$ Lorenzův-Polarizační faktor, T_{hkl} texturní faktor a E_{hkl} extinkční faktor. Škálovací faktor není znám. Budeme pro něj, podobně jako s faktorem B , hledat nejlepší hodnotu

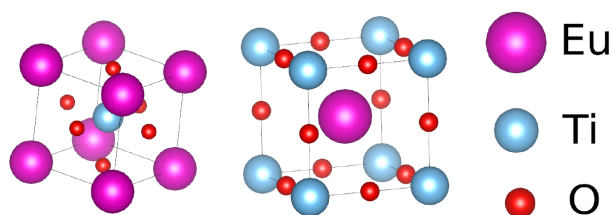
Vypočítáme intenzity pro jednotlivé peaky a porovnáme je s naměřenými hodnotami. Přitom se snažíme pomocí teplotního a škálovacího faktoru vypočtené hodnoty co nejlépe přiblížit naměřeným. Buňka jejíž intenzity se nejvíce shodují s naměřenými hodnotami je naše hledaná elementární buňka.

3 Výsledky

Látku, kterou jsme zkoumali byl již zmíněný $EuTiO_3$. Zjistili jsme, že její elementární buňka je kubická primitivní. V krystalografických tabulkách jsme našli celkem čtyři různé možnosti rozložení atomů. Ovšem později jsme přišli na to, že byly pouze dvě, jelikož ty druhé dvě jsme

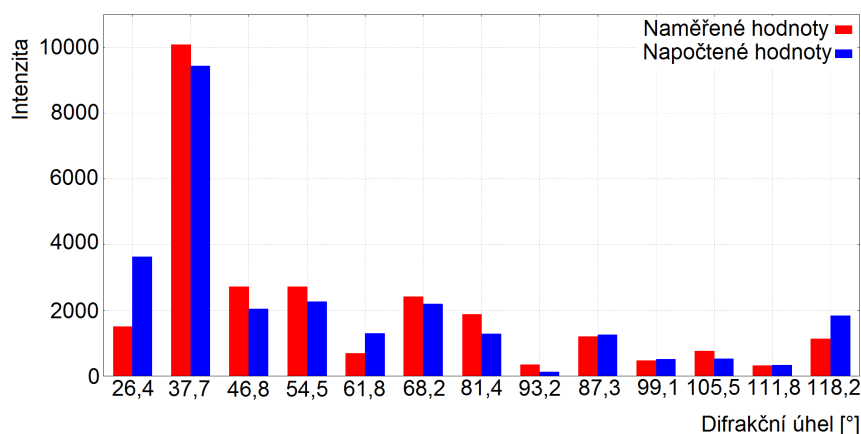
byli schopni získat pouhým přemístěním elementární buňky a nedošlo ke změně v mikrostruktuře.

Výsledná elementární buňka vypadala takto:



Obr. 2: Výsledná elementární buňka [6]

Strana elementární buňky vyšla $a = 3,9\text{\AA}$. Hodnota škálovacího faktoru byla $K = 0,026$ a výsledný faktor B se rovnal 1,6.



Obr. 3: Porovnání naměřených hodnot s napočtenými

Na grafu vidíme porovnání naměřených hodnot s napočtenými hodnotami výsledné elementární buňky.

4 Shrnutí

Rentgenová difrakce se využívá ke zjištění mikrostruktury látek a je populární kvůli svému nedestructivnímu charakteru. Tuto metodu jsme použili ke zjištění elementární buňky látky EuTiO_3 . Hodnoty většiny faktorů jsme našli v krystalografických tabulkách. Vliv texturního, extinkčního a okupačního faktoru jsme zanedbali. Předpokládali jsme totiž, že krystal látky je dokonalý a tudíž jsme neuvažovali možné vady v jeho struktuře.

5 Poděkování

Chtěl bych poděkovat Ing. Janu Drahokoupilovi, Ph. D. za jeho spolupráci s experimentem, patřičné připomínky a pomoc při teoretické přípravě.

Reference

- [1] V. K. Pecharsky, P. Y. Zavalij, *Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of materials*, 2nd. edition, New York (2009), Springer, ISBN 978-0-387-09578-3.
- [2] I. Kraus, N. Ganev, *Technické aplikace difrakční analýzy*, 1st. edition, Praha (2004), Vydavatelství ČVUT, ISBN 80-01-03099-7.
- [3] T. Hahn, *International Tables of Crystallography, Volume A: Space-Group Symmetry*, 5th. edition, Dordecht (2005), Springer, ISBN 0-7923-6590-9.
- [4] kol. autorů, *The Double-Slit Experiment Cracked Reality Wide Open*, <https://curiosity.com/topics/the-double-slit-experiment-cracked-reality-wide-open-curiosity/>, 2.12.2017.
- [5] kol. autorů, *III. Prostorové mřížky a krystalové soustavy*, <http://www.xray.cz/kryst/str03a.htm>, 2.12.2017.
- [6] Amakubo, Tsukuba-shi, Ibaraki (Japonsko), *Program Vesta*, <https://jp-minerals.org/vesta/en/>, Program umožňuje vizualizaci 3D modelů elementárních buněk, elektronů, atd. 2.12.2017.
- [7] AK LECTURES, *X-Ray Diffraction and Bragg Equation*, <https://www.youtube.com/watch?v=aFyjUhFCL5Q>, 2.12.2017.