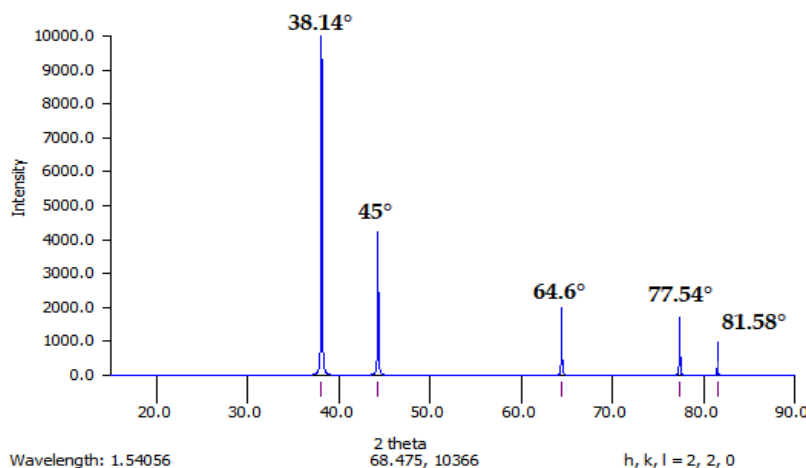


## Wskaźnikowanie dyfraktogramu substancji w przypadku znanych parametrów komórki elementarnej

### Zadanie 1

Rentgenogram srebra ( $a_0 = 4.08 \text{ \AA}$ ) wykonany przy zastosowaniu promieniowania  $\text{CuK}\alpha$  ( $\lambda = 1.5405 \text{ \AA}$ ) prezentuje poniższy rysunek. Wywskaźnikuj rentgenogram, określ typ komórki Bravais.



### Rozwiązanie:

Związek krystalizuje w układzie regularnym ( $a_0 = 4.08 \text{ \AA}$ ) – do wywskaźnikowania rentgenogramu należy zastosować zmodyfikowane równanie kwadratowe dla układu regularnego (1)

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a_0^2} (h^2 + k^2 + l^2) \quad (1)$$

1) Z widma odczytujemy wartości kątów ugięcia i obliczamy miary kątów  $\theta$ .

$2\theta$ [°]	$\theta$ [°]
38.14	19.07
45	22.50
64.6	32.30
77.54	38.77
81.58	40.79

2) Dla każdego kąta  $\theta$ , korzystając ze wzoru (1), obliczmy sumę ( $h^2 + k^2 + l^2$ )

Dla kąta  $\theta = 19.07^\circ$  :

$$\sin^2 19.07 = \frac{(1.542)^2}{4 \cdot (4.08)^2} (h^2 + k^2 + l^2)$$

$$0.1067 = 0.0356 (h^2 + k^2 + l^2)$$

$$(h^2 + k^2 + l^2) = 3$$

$\theta$ [°]	$(h^2 + k^2 + l^2)$
19.07	3
22.5	4
32.30	8
38.77	11
40.79	12

3) Wyliczonym wartościom sumy  $(h^2 + k^2 + l^2)$  przypisujemy wskaźniki  $hkl$

$(h^2 + k^2 + l^2)$	wskaźniki $hkl$
3	111
4	200
8	220
11	311
12	222

Możemy korzystać z Tablicy 2 (Wskaźniki refleksów dyfrakcyjnych i sumy ich kwadratów dla układu regularnego) w instrukcji 11 (<http://uranos.cto.us.edu.pl/~crystal/mag/mag11.pdf>)

Tablica 2. Wskaźniki refleksów dyfrakcyjnych i sumy ich kwadratów dla układu regularnego.

Układ regularny			
$h^2 + k^2 + l^2$	$hkl$		
	$P$	$F$	$I$
1	100	-	-
2	110	-	110
3	111	111	-
4	200	200	200
5	210	-	-
6	211	-	211
7	-	-	-
8	220	220	220
9	300, 221	-	-
10	310	-	310
11	311	311	-
12	222	222	222
13	320	-	-
14	321	-	321

4) Wyznaczone wskaźniki refleksów mają tę cechę, że wszystkie są parzyste (200, 220, 222) lub wszystkie są nieparzyste (311). Wskazuje to na typ komórki translacyjnej  $F$ .

**Wskaźnikowanie dyfraktogramu substancji z układu regularnego  
w przypadku nieznanymi parametrów komórki elementarnej**

**Zadanie 2**

Wykonano rentgenogram substancji polikrystalicznej krystalizującej w układzie regularnym z zastosowaniem promieniowania  $\text{CuK}\alpha$  ( $\lambda=1.5405\text{\AA}$ ). Linie dyfrakcyjne zarejestrowano przy następujących wartościach kątów ugięcia  $44.40^\circ$ ,  $64.59^\circ$ ,  $81.76^\circ$ ,  $98.31^\circ$ . Wywskaźnikuj rentgenogram i oblicz stałą sieciową.

**Rozwiązanie:**

1) Korzystając ze zmodyfikowanego równania kwadratowego (1) dla układu regularnego

$$\sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a_0^2} (h^2 + k^2 + l^2) \quad (1)$$

wyliczmy  $\sin^2\theta$

$2\theta [^\circ]$	$\theta [^\circ]$	$\sin^2\theta$
44.40	22.20	0.1427
64.59	32.295	0.2855
81.76	40.88	0.4283
98.31	49.155	0.5723

2) Wyliczamy

$$\frac{\sin^2\theta_{h_n k_n l_n}}{\sin^2\theta_{h_1 k_1 l_1}}$$

gdzie  $\theta_{h_1 k_1 l_1}$  to odpowiada pierwszemu refleksowi na rentgenogramie, a każdemu kolejnemu odpowiednio  $\theta_{h_2 k_2 l_2}$ ,  $\theta_{h_3 k_3 l_3}, \dots, \theta_{h_n k_n l_n}$ .

$2\theta [^\circ]$	$\theta [^\circ]$	$\sin^2\theta_{hkl}$	$\frac{\sin^2\theta_{h_n k_n l_n}}{\sin^2\theta_{h_1 k_1 l_1}}$	*	$h^2 + k^2 + l^2$
44.40	22.2	0.142	$0.1427 : 0.1427$		
64.59	32.295	0.285	$0.2855 : 0.1427$		
81.76	40.88	0.43	$0.4283 : 0.1427$		
98.31	49.155	0.57	$0.5723 : 0.1427$		

$2\theta [^\circ]$	$\theta [^\circ]$	$\sin^2\theta$	$\frac{\sin^2\theta_{h_n k_n l_n}}{\sin^2\theta_{h_1 k_1 l_1}}$	*	$h^2 + k^2 + l^2$
44.40	22.2	0.142	1		
64.59	32.295	0.285	2		
81.76	40.88	0.43	3		
98.31	49.155	0.57	4		

3) Gdy uzyskane wartości  $\frac{\sin^2\theta_{h_n k_n l_n}}{\sin^2\theta_{h_1 k_1 l_1}}$  są:

- liczbami całkowitymi to mnożnik zapisany w tabeli jako \* będzie równy liczbie 1

- liczbami całkowitymi lub wykazują po przecinku cyfrę 5 to mnożnik \* będzie równy liczbie 2
- liczbami całkowitymi lub wykazują po przecinku cyfrę 33 lub 66 to mnożnik \* będzie równy liczbie 3

W zadaniu uzyskane wartości  $\frac{\sin^2\theta_{hknln}}{\sin^2\theta_{h1k1l1}}$  są liczbami całkowitymi, wobec tego mnożnik będzie wynosił 1.

$2\theta [^\circ]$	$\theta [^\circ]$	$\sin^2\theta$	$\frac{\sin^2\theta_{hknln}}{\sin^2\theta_{h1k1l1}}$	*	$h^2 + k^2 + l^2$
44.40	22.2	0.142	1	· 1	1
64.59	32.295	0.285	2	· 1	2
81.76	40.88	0.43	3	· 1	3
98.31	49.155	0.57	4	· 1	4

4) Wyliczonym wartościom sumy ( $h^2 + k^2 + l^2$ ) przypisujemy wskaźniki  $hkl$

$(h^2 + k^2 + l^2)$	wskaźniki $hkl$
1	100
2	110
3	111
4	200

Możemy korzystać z Tablicy 2 (Wskaźniki refleksów dyfrakcyjnych i sumy ich kwadratów dla układu regularnego) w instrukcji 11 (<http://uranos.cto.us.edu.pl/~crystal/mag/mag11.pdf>)

Tablica 2. Wskaźniki refleksów dyfrakcyjnych i sumy ich kwadratów dla układu regularnego.

Układ regularny			
$h^2 + k^2 + l^2$	$hkl$		
	$P$	$F$	$I$
1	100	-	-
2	110	-	110
3	111	111	-
4	200	200	200
5	210	-	-
6	211	-	211
7	-	-	-

Pierwszy refleks ma wskaźniki 100, jest to komórka translacyjna  $P$ . Wartości  $hkl$  są dowolne,

5) Wyliczamy wartość stałej sieciowej  $a_0$  ze wzoru (1)

$2\theta [^\circ]$	$\sin^2\theta$	$a_0 [\text{Å}]$
44.40	0.142	4.18
64.59	0.285	4.17
81.76	0.43	4.145
98.31	0.57	4.17

Średnia wartość  $a_0 = 4.166 \text{ Å}$ .