

Določanje velikosti kristalov – premer zrna d

$$d = k \cdot \lambda / \beta \cdot \cos \theta$$

d - premer zrna

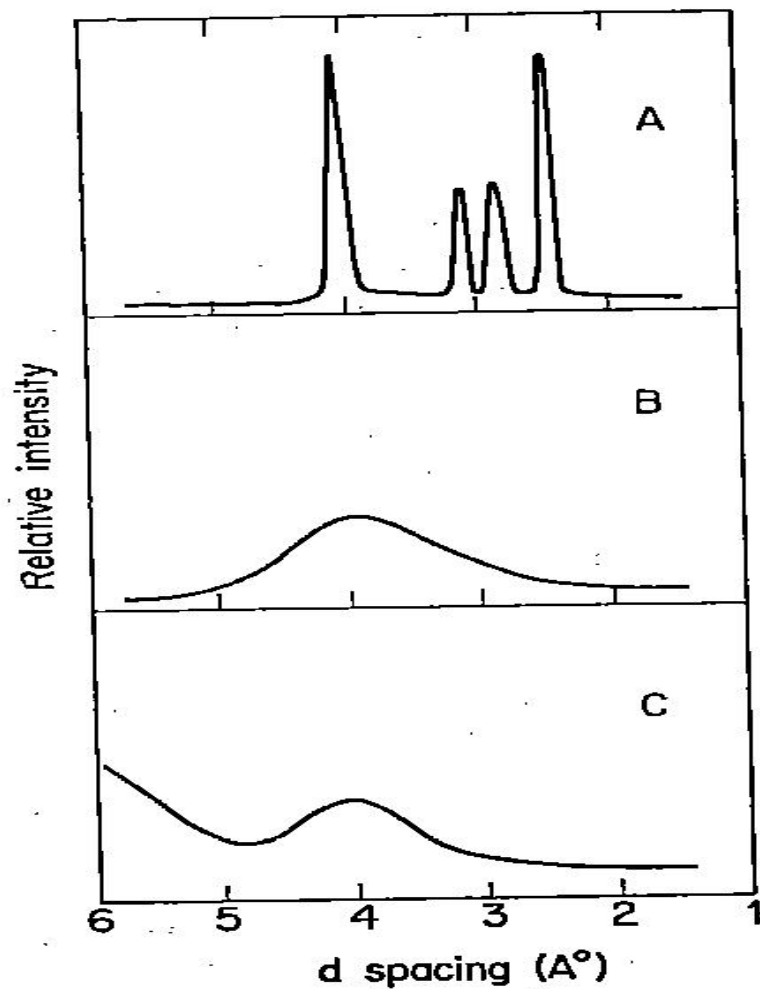
λ - rtg žarkov

β - širina pika

θ - uklonski kot

Zrna z $d > 0,1 \mu\text{m}$ že ožijo pik \Rightarrow delna urejenost

Slika: rentgenogrami kristobalita, taljene kremenice in silika gela



RTG difrakcija monokristalov

- točkast spekter na filmu
- določanje vrste in velikosti osnovne celice kristala
- simetrija
- popolna struktura kristala

Slika: rentgenogram monokristala

Določitev vrste in velikosti osnovne celice

$$\lambda = 2d \cdot \sin\theta$$

Postopek:

- določitev θ na posnetku
- $\sin^2\theta$, λ/d^2 (natančnost $\pm 0,02\%$)
- slučajna napaka (ponovitev meritve)
- sistematska napaka (uporaba internega standarda)
- interpretacija posnetka, če je znana singonija (n.pr. kubična \rightarrow določitev ene vrednosti – a_0)

$$\lambda = 2d \cdot \sin\theta$$

$$d = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$$

$$\sin^2\theta_{hkl} = \lambda^2 / 4a^2 \cdot (h^2 + k^2 + l^2)$$

$$\lambda = 1,54 \text{ \AA za Cu}$$

$$h^2 + k^2 + l^2 = N$$

- izmerimo $\theta \Rightarrow \sin^2\theta$ (iz tabele) $\Rightarrow N \Rightarrow hkl$ (dovoljene) \Rightarrow (iz tabele) a_0
ali krajše
- izmerimo $2\theta \Rightarrow d$ (iz tabele) in $N \Rightarrow a_0$ iz druge formule $d = a/N^{1/2}$

Dovoljene vrednosti N v kubični ingoniji:

- | | |
|--------------------------------------|------------------------------|
| - P vse možne | primitivna celica |
| - F h, k, l so vse lihe ali vse sode | ploskovno centrirana celica |
| - C h+k+l = sodo število | prostorsko centrirana celica |

Vrednosti $\sin^2\theta$ imajo v kubični singoniji skupni faktor, za ostale singonije poskusno določanje.

Natančnejši izračun za a_0 :

iz $\sin^2\theta = \lambda^2/4a^2 \cdot N$ (logaritmujemo) pri $\theta = 80 - 90^\circ$.

Primer: praškovni posnetek galenita PbS Javor (kubična singonija)

2θ	d	θ	$\sin^2\theta$	N	N_{popr}	$(N/\sin^2\theta)^{1/2}$	a_0	$a_0=dN^{1/2}$	h k l	I
26,0	3,4269	13,0	0,0506	3,03	3	7,699	5,928	5,936	1 1 1	50
30,16	2,9631	15,08	0,0677	4,06	4	7,686	5,918	5,926	2 0 0	82
43,1	2,0987	21,55	0,1349	8,09	8	7,700	5,929	5,936	2 2 0	47
51,06	1,7887	25,53	0,1857	11,14	11	7,696	5,926	5,932	3 1 1	23
53,5	1,7127	26,75	0,2026	12,15	12	7,696	5,926	5,933	2 2 2	10
62,60	1,4839	31,30	0,2699	16,19	16	7,699	5,928	5,935	4 0 0	7
68,94	1,3621	34,47	0,3203	19,22	19	7,702	5,930	5,937	3 3 1	6
71,0	1,3275	35,50	0,3372	20,23	20	7,701	5,929	5,937	4 2 0	12
79,0	1,2119	39,5	0,4046	24,27	24	7,702	5,930	5,937	4 2 2	7
84,86	1,1426	42,43	0,4552	27,31	27	7,702	5,930	5,937	5 1 1	4

ASTM: a_0 za PbS = 5,9362 Å