

# METODE DIFRAKCIJE RENTGENSKIH ŽARKOV

## Princip difrakcije - uklona

- kristal s tridimenzionalno periodično razporeditvijo sestavnih delcev → uklonska mrežica
- uklon elektromagnetnega valovanja z določeno  $\lambda$  ( $\lambda$  je enakega reda velikosti kot medatomske razdalje v strukturi)  $\Rightarrow$  strukturna slika kristala
- uklonski žarki z:  $\lambda_{\text{uklon.}\dot{z}} = \lambda_{\text{vpadlega žarka}}$
- Braggov zakon:  $n\lambda = 2d \cdot \sin\theta$
- elektromagnetno valovanje: rtg žarki, elektroni, nevtroni

## Metode

- rentgenska praškovna metoda
- visokoločljivostna praškovna difrakcija z rtg žarki, nevtroni, rtg sinhrotronskimi žarki (krajše  $\lambda$ )
- rentgenska difrakcija na monokristalu
- visokotemperaturna rentgenska difrakcija

## Viri elektromagnetnega valovanja

- rtg cev s tarčo iz:

$$\text{Mo } \lambda = 0,71 \text{ \AA}$$

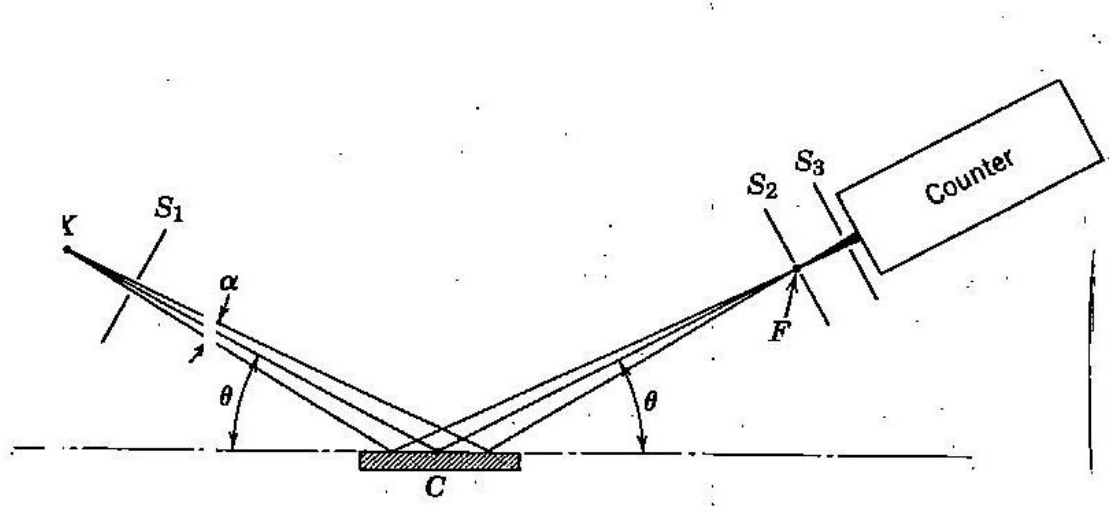
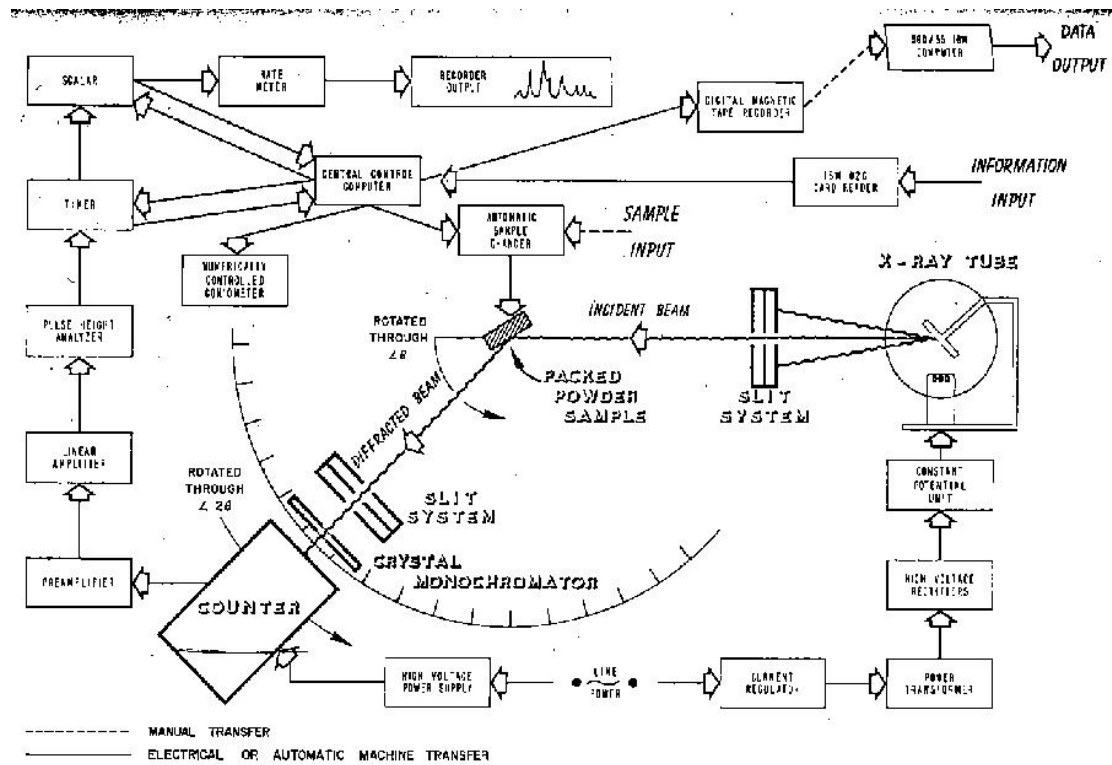
$$\text{Cu } \lambda = 1,54 \text{ \AA}$$

$$\text{Cr } \lambda = 2,29 \text{ \AA}$$

- kristalni monokromator ali  $\beta$  – filter (monokromatski žarki)
  - kolimator (paralelni žarki)
  - detektor: film, scintilacijski, proporcionalni, polprevodniški števec
- sinhrotron: zvezni vir rtg žarkov

# Princip RTG difraktometra

## Slika: sestavni deli difraktometra

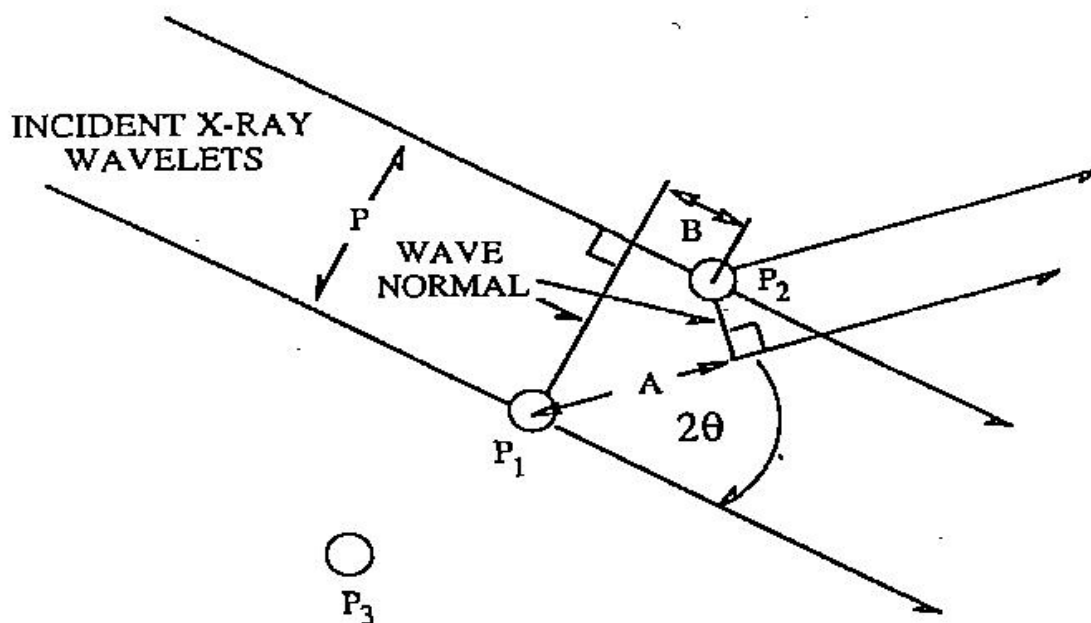


## Osnovna teorija rtg difrakcije

### 1. Lauejeva difrakcija

- kota vpadlega in uklonjenega žarka nista enaka

Slika: uklon na enodimenzionalni mreži



- interferenca nastopi, ko je:

$$m\lambda = a_o(\cos \phi_a - \cos \psi_a)$$

- za trodimenzionalno mrežo velja:

$$n\lambda = b_o(\cos \phi_b - \cos \psi_b)$$

$$p\lambda = c_o(\cos \phi_c - \cos \psi_c)$$

$m, n, p$  - mnogokratniki

$a, b, c$  - oznake koordinatnega sistema

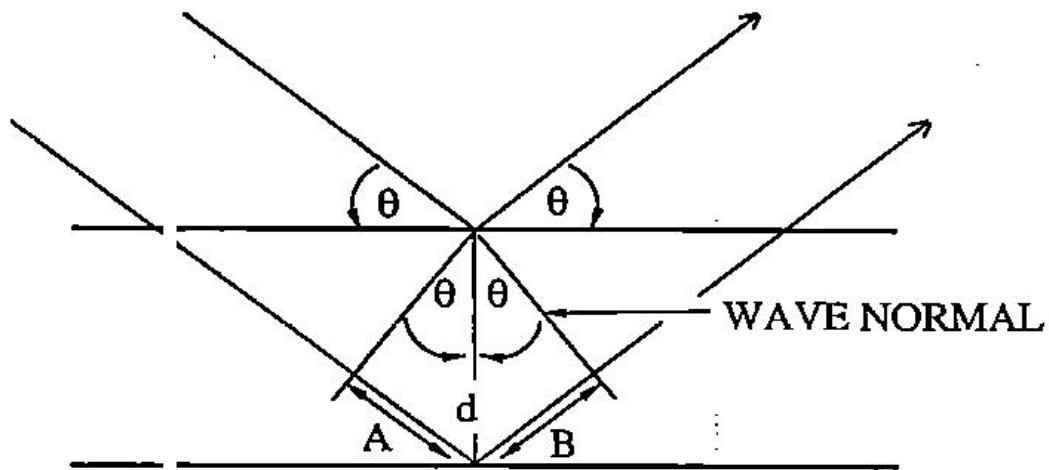
$\psi$  - kot vpadnega žarka s pravokotnico na mrežno ravnino

$\phi$  - kot uklonjenega žarka s pravokotnico na mrežno ravnino

### 2. Braggova konstrukcija

- popravljena Lauejeva difrakcija:

Slika: uklon žarkov na mrežni ravnini, ko sta vpadni in uklonski kot enaka

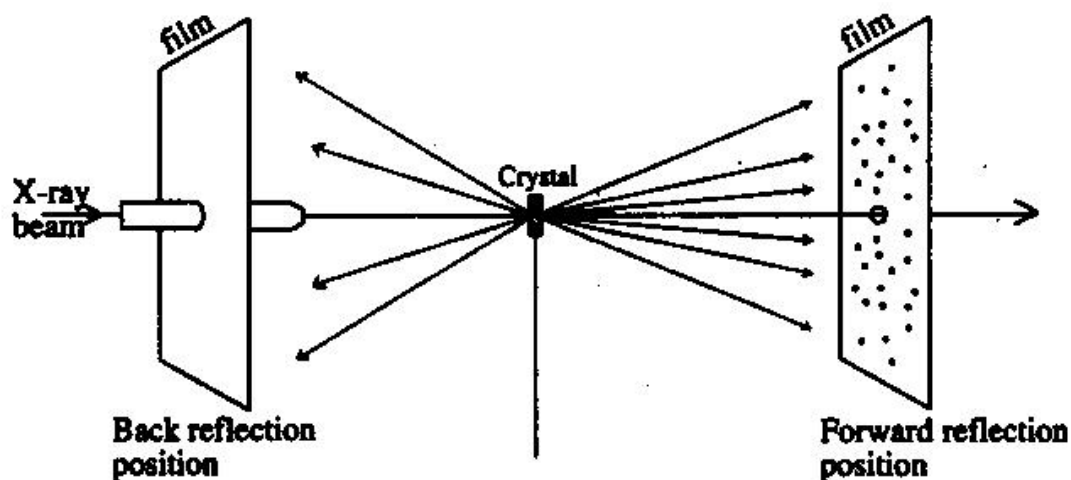


- sistem enačb se skrajša:  
 $n\lambda = 2d \cdot \sin\theta$

### Detekcija uklonjenih žarkov

- Ewaldova kroglja
- recipročna mreža na površini Ewaldove krogle, kamor se preslika z uklonjenimi žarki difrakcijska slika kristala
- služijo kot identifikacijsko sredstvo

Slika: nastanek uklonov na recipročni ravnini. Ravnina je postavljena kot tangenta na Ewaldovo kroglo. Primer difrakcije monokristala



### Intenziteta uklonjenih rtg žarkov

- intenziteta je odvisna od vrste faktorjev:
  - trigonometrični faktor - t
  - pomnoževalni faktor - p
  - absorpcijski faktor - A
  - strukturni faktor - F ( $\Sigma$  geometrijski f., strukturni f., atomski f. sipanja, temperaturni f.)

$$I = ((1 + \cos^2 2\theta) / \sin^2 \theta \cdot \cos \theta) \cdot p \cdot A \cdot |F|^2$$

- delna izguba energije zaradi:
  - neelastično sipanje rtg žarkov na kristalu
  - fazna razlika uklonjenih žarkov (atomski faktor sipanja)
  - ekstinkcijski pojav (sekundarna refleksija). Zato vzorec dobro drobimo. Pojav je manjši pri velikih uklonskih kotih