

Dyfrakcja promieni X na kryształach NaCl

XX

STUDENCKA

SESJA

PLAKATOWA

INSTYTUT FIZYKI
WYDZIAŁ FIZYKI, ASTRONOMII
I INFORMATYKI STOSOWANEJ UJ



AUTOR:
KURYŁOWICZ PAWEŁ

OPIEKUN:
PROF. DR HAB.
RAFAŁ ABDANK-KOZUBSKI

Abstrakt

Za pomocą dyfraktometrii proszkowej wyznaczono stałą sieciową NaCl, która wyniosła $a=5,6404(3)[\text{Å}]$.

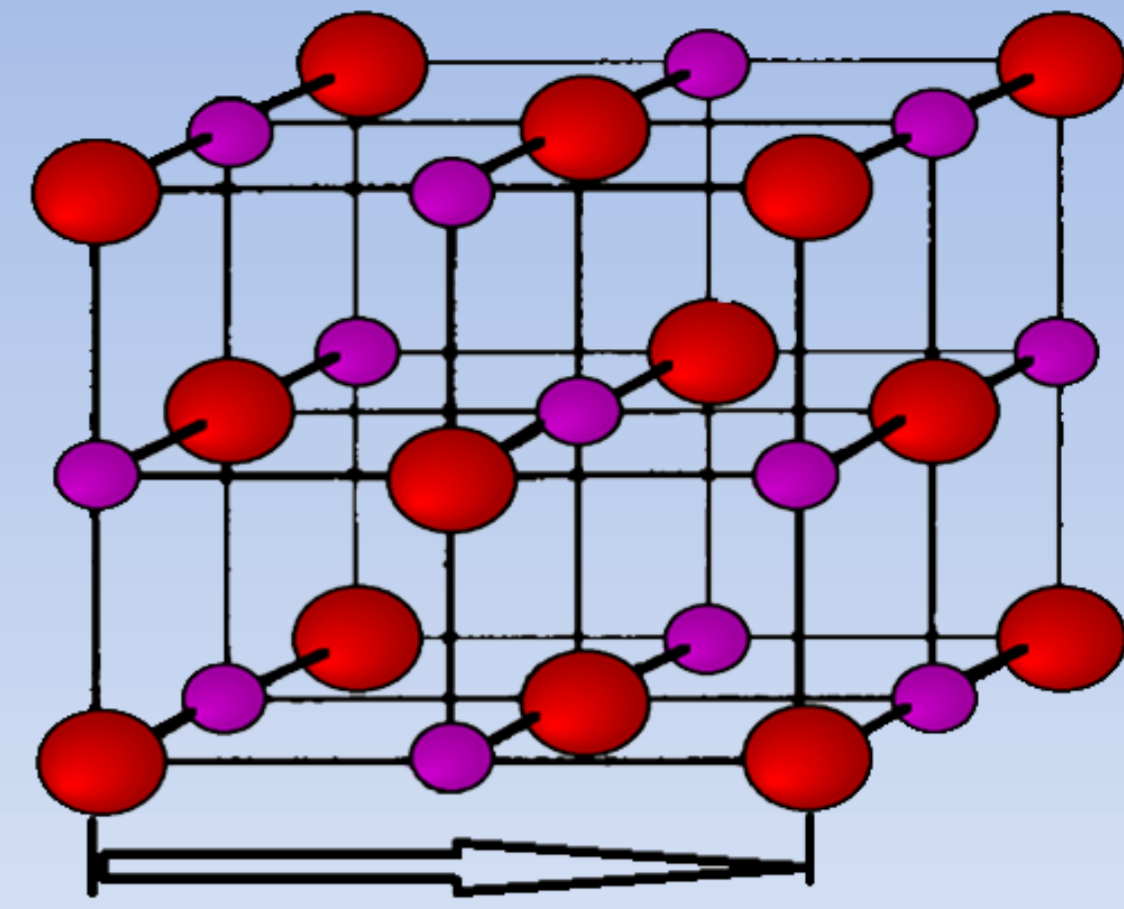
O co chodzi?

Dyfraktometria rentgenowska jest techniką analityczną opierającą się na dyfrakcji promieni X na kryształach. Wkorzystuje się w niej prawo Bragga, które wiąże długość fali λ z odległością d między płaszczyznami krystalograficznymi oraz kątem padania fali θ : $2d\sin\theta=n\lambda$, gdzie n jest liczbą naturalną.

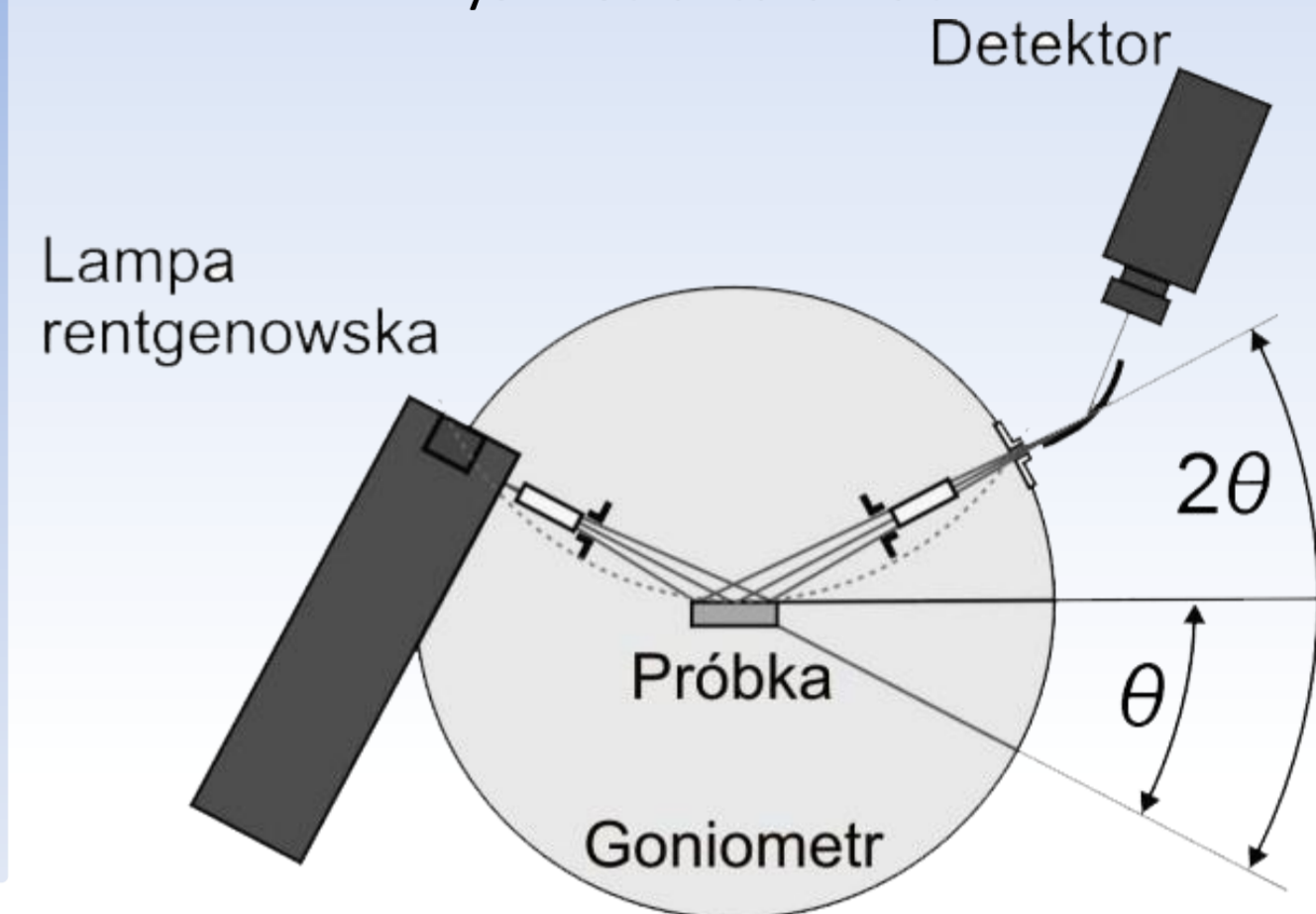
Badanie przeprowadzono na sproszkowanej próbce NaCl. Wiązka promieni X pada na przypadkowo ułożone kryształki, odbija się i następnie interferuje. Wiedząc, że NaCl krystalizuje w regularnym układzie fcc można zapisać, że: $a = d\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$, gdzie a to stała sieciowa, hkl są wskaźnikami Millera, a d to odległość między płaszczyznami.

Jak?

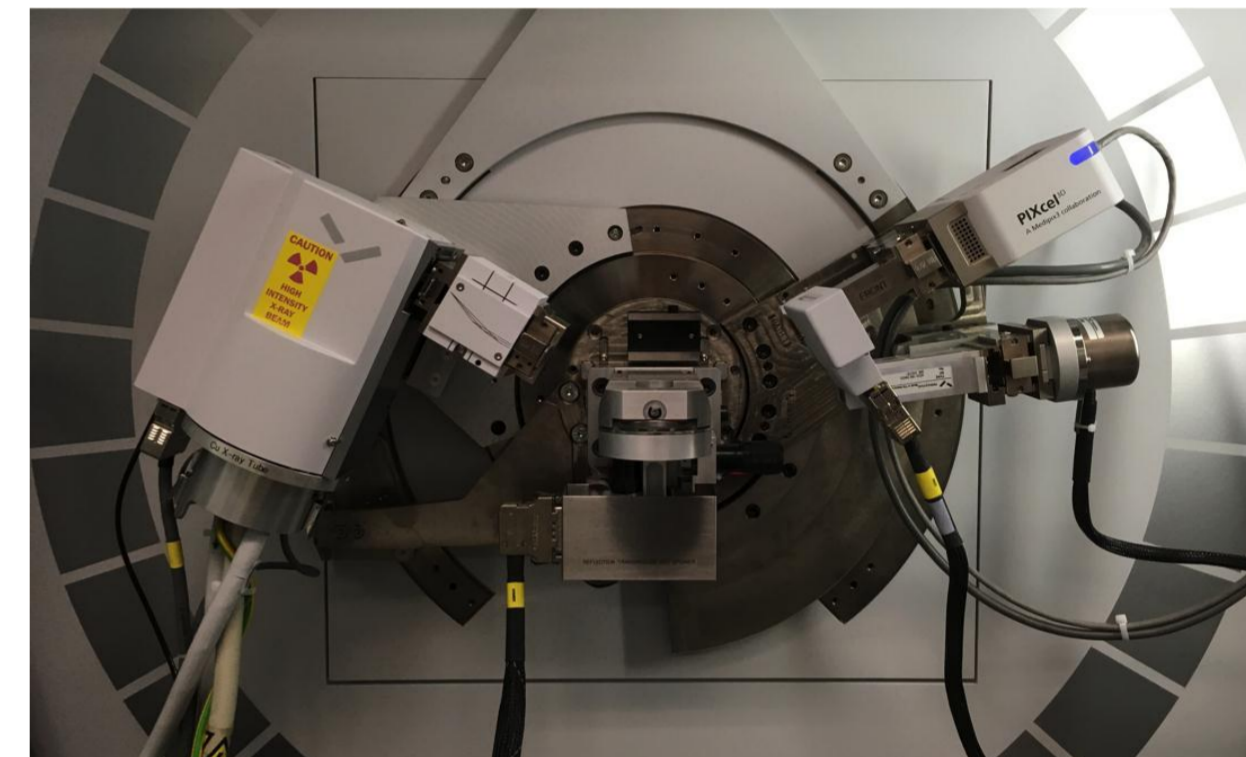
W eksperymencie wykorzystano dyfraktometr rentgenowski Epyrean (PANalytical) pracujący w geometrii Bragga-Brentano. W okóło nieruchomej próbki po okręgu poruszają się lampa rentgenowska oraz detektor w taki sposób, że kąt między płaszczyzną próbki a osią lampy jest taki sam jak kąt między osią detektora a próbką. Długości fali promieniowania charakterystycznego dla miedzi (anoda) wynoszą: $K\alpha_1=1,54051[\text{Å}]$, $K\alpha_2=1,54433[\text{Å}]$, $K\beta=1,39217[\text{Å}]$.



Rys. 1 Struktura NaCl



Rys 2. Schemat dyfraktometru



Rys 3. Dyfraktometr użyty w badaniu

I co dalej?

Łącząc i przekształcając prawo Bragga z wyrażeniem na odległość między płaszczyznami dla układu fcc otrzymujemy, że $\log(\sin^2(\theta)) - \log(h^2 + k^2 + l^2) = \text{const}$.

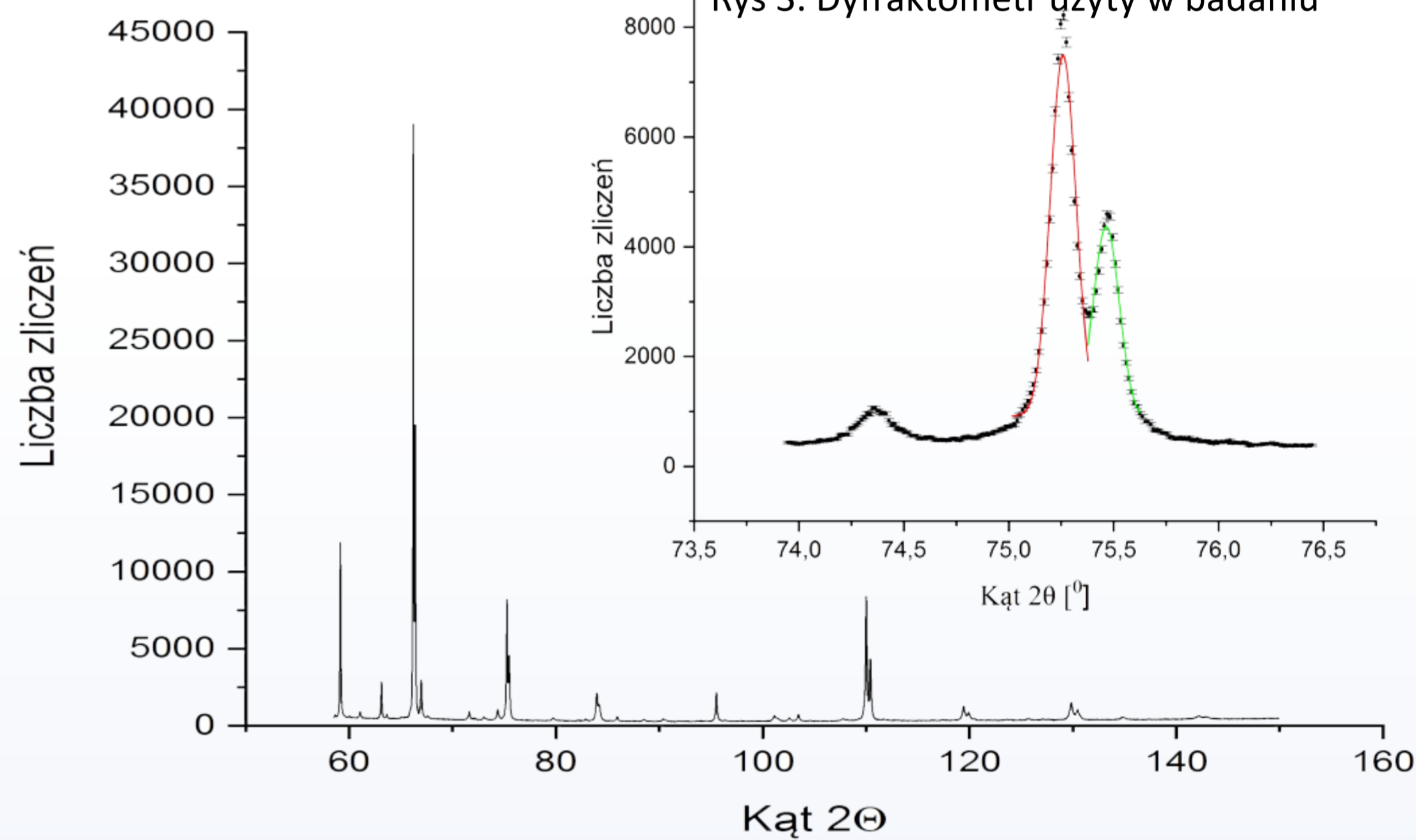
Wyznaczono położenie wszystkich refleksów oraz wszystkich możliwych wartości hkl (z faktu istnienia reguły wygaszeń wskaźniki hkl mogą być tylko parzyste lub nieparzyste).

Następnie wyrysowano logarytmy $\sin^2(\theta)$ oraz $h^2 + k^2 + l^2$ w programie OriginPro i przesuwano do nałożenia się punktów. W ten sposób wyznaczono wskaźniki dla każdego refleksu.

Po wywskaźnikowaniu wyznaczono dokładne wartości refleksów dyfrakcyjnych dla kątów $60^\circ < 2\theta$ dopasowując do ich profilów funkcje Gaussa. Umożliwiło to wyznaczenie z każdego refleksu stałej sieci NaCl oraz jej niepewności.

W celu wyeliminowania błędu systematycznego aparatury wykonano wykres stałej sieciowej w funkcji $\cos^2\theta$. Za pomocą liniowej regresji oraz ekstrapolacji wyznaczono wartość stałej sieciowej dla $\cos^2\theta=0$.

Uzyskana wartość to $a=5,6404(3)[\text{Å}]$.



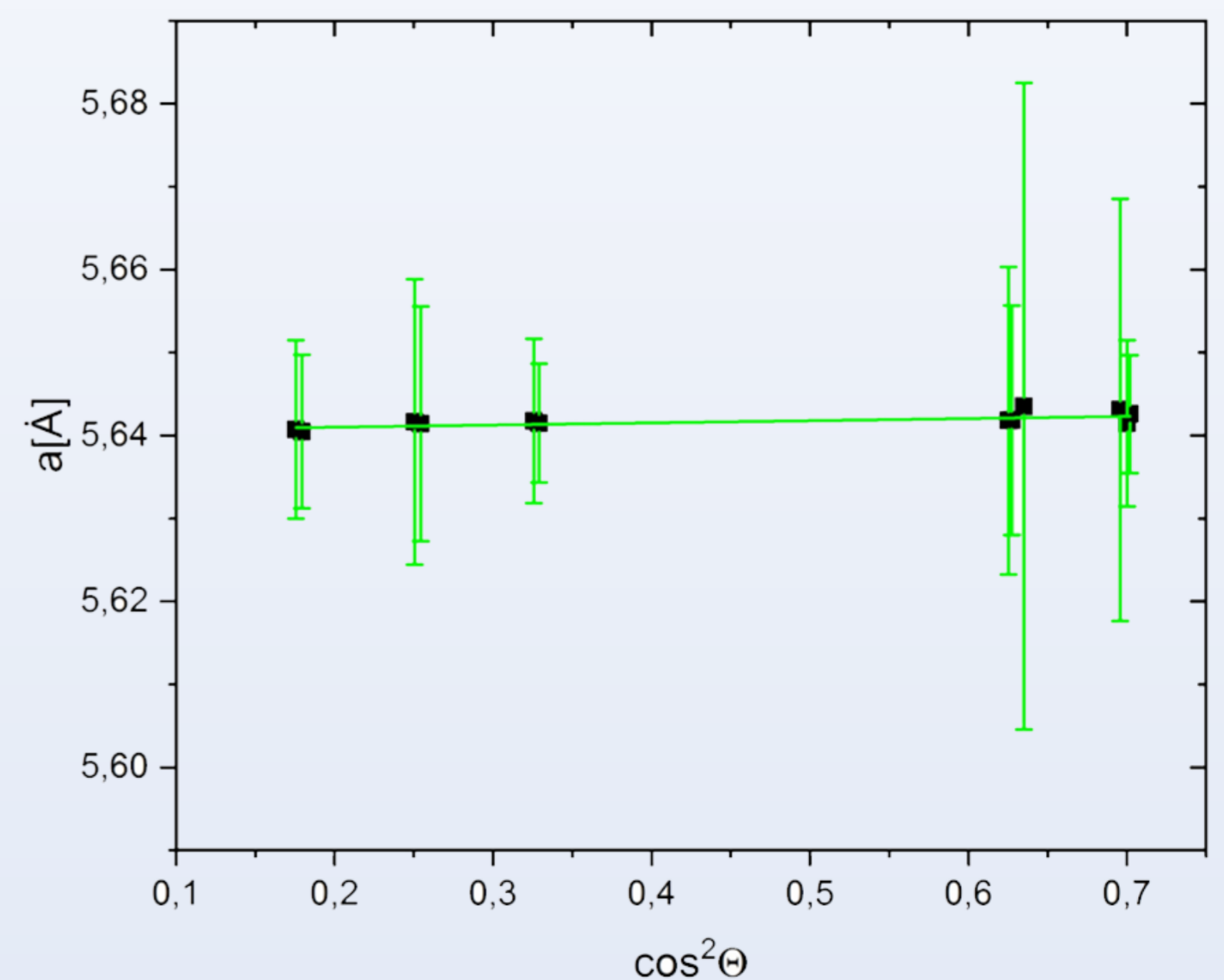
Rys 4. Dyfraktogram wraz z przykładowym dopasowaniem funkcji Gaussa dla $K\alpha_1$ i $K\alpha_2$.

W skrócie!

Dyfraktometria proszkowa pozwala na wyznaczenie stałej sieciowej oraz struktury badanej próbki, dzięki czemu można określić z jakim związkiem mamy do czynienia. Metoda ta jest niezwykle precyzyjna przez co bardzo często wykorzystuje się ją w szeroko pojętym badaniu materiałów.

Bibliografia

Rys 1. <http://nextews.com/1e3f0edb/>
Rys 2. <http://docplayer.pl/41076722-Synteza-i-badania-spektroskopowe-luminoforow-do-energooszczednych-zrodel-swiatla.html>
Rys 3. <http://jiam.utk.edu/facilities/diffraction/instruments.php>
Z.Bojarski, „Krystalografia”, Wydawnictwo PWN, Warszawa, 2007



Rys 5. Wykres zależności stałej sieciowej od $\cos^2\theta$.

26