

# Tiszikai mérési módszerek

előadó: Kovácsok Károly

honlap: metal.elte.hu → vizsgakérdések (részletes tematika)

↳ jelölés: szkt

## 1. óra

1) Mérés, kísérletelés nem ugyanaz

- görög gondolkodásban nem a kísérletelés a fontos

↳ Platon, Aristotelész (összefoglaló)

- középkorban fogalmazódik meg a kísérletelés fontossága (Bacon)

• Galilei: első lényeges kísérletelés

• Newton (összefoglaló)

2) Mérés:

a) → alapszempontok kellene

→ mértékegység kell

→ matematikával lehetnének válni a megismerés

<sup>összmérés:</sup>  
↳ Eratoszthenész megmérte a Föld kerületét



• franciák sokat foglalkoztak az alapszempontokkal  
→ méter

→ Végül a méter mértékegységet tisztelték követelték

• Michelson javasolta, hogy hullámhosszhoz mérjük a métert, mert  
kellene pontosabb, mint az etalon

→ kripton könnyebben mérhető, mint a Cd, keskenyebb feltekinthetőség

- Bay Keltán javasolta, hogy a lényegessége vesessük vissza a mérték  
( $10^{-9}$ -ról  $10^{-16}$ -ra járult a pontosság)
- időmérésre van visszavetve

### c) időmérés:

- Cs sziklokrist (NIST: national institute of measurement)
- létező atomokat (ne mozgjanak ← Doppler-eff. miatt)
- gerjesztési energiával kisebb energiájú létező sugárzások

$$\Delta E = \frac{v}{c} \cdot E_f \quad (\text{Doppler})$$

- ha szembe megy a fotonnal, akkor elnyeli a fotont (lassul), felgyjéd, majd sugároz amely irányba (a kisugárzásakor már nem nyri vissza adott irányú impulzust)

- ezután mikrohullámú tébe kerül a Cs, ami gerjeszt
- detektor érzékeli a Cs-ból kijövő fotonokat, és úgy hangolja a mikrohullámot, hogy max. gerjesztés legyen
- nem tudjuk, mi az idő (Szt. Agoston)
- Newton: idő abszolút
- rel. elm.: idő relatív
- kvantummech.:  $\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar$
- Planck: a mérési utasítás adja meg a mennyiség definícióját

### d) Tömegmérés:

- általában súlymérés, vagy rugó tömegmérés (tehetetlenség)

e) SI alapegységek: hossz, tömeg, idő, hőmérséklet, anyagmennyiség, fényerősség

→ az összes többi mennyiség ezek hatványainak

- dimenzió nélküli mennyiségek, pl.:

- sűrűség
- térség

- SI prefixumok

- nem SI métekegységek

- megengedettek
- nem -II-

1) Dimenziók:

- pl. hosszúság:  $[l] = L$  (m)

- rögzített zárral jelöljük

- dimenzióanalízis:

• fizikai mennyiségek általános alakja:

$$Q = [A]^a \cdot [B]^b \cdot [C]^c \dots$$

• pl. inga periódusideje

$$t = C \cdot g^a \cdot l^b \cdot m^c$$

$C$ : konstans (dim. nélküli)  
 $g, l, m$ : paraméterek

homogenitás miatt

$$a + b = 0$$

$$-2a = 1$$

$$c = 0$$

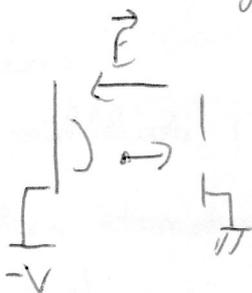
$$\Rightarrow t = C \cdot \sqrt{\frac{l}{g}}$$

Források, detektorok

1) Részecskegyorsítók:

- lineáris gyorsítók:

- $e^-$ ,  $e^+$ ,  $\mu^+$ , ionok gyorsítása
- pl. RTG cső, TV képernyő
- elektrosztatikus ter gyorsít, a katód magja az ionokkal, az anód a célterület



- katód:
  - ↳ izotókatódos
  - ↳ hidegkatódos (elektromos térrel melegítik le az  $e^-$ -kat) } ionok is hasonlóan
- nagyobb energiájú részecskék előáll. -ra komolyabb telepítésű lin.

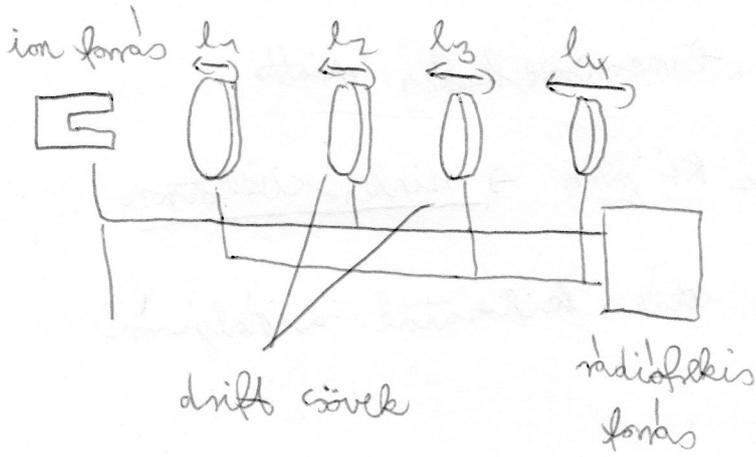
gyorsítók (LINAC: linear accelerator)

- ↳ méret: néhány m - 100 m (CERN → LINAC 4 = 40 km)
- ↳ ( $e^-, e^+, \dots$ ) lyukas elektrodák között gyorsul a töltött részecske



- ↳ irányítás: eltérítő (bending) mágnes
- ↳ fókuszálás: kvadrupól mágnes
- ↳ feszültség előállítás: → 25 millió V (25 MeV energia) Van de Graaf-generátor
- Tandem gyorsítóban kétszeres energia (50 MeV)

- rádiófrekvenciás lineáris gyorsító (1928)



$$l_1 < l_2 < l_3 < l_4$$

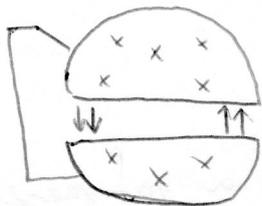
mert egyre gyorsul a töltött részecske  $\rightarrow$  azonos fázisú gyorsítóshoz más hosszúságú drift csövek kellene

Stanford University: 3km hosszú LINAC

50 GeV-es  $e^-, e^+$  energia

- ciklotron:

- Lawrence 1929-ben alkotta meg az első
- gyorsító elektromos ténél az ún. „Dee”-k között



• mágneses ténél tartjuk körpályán

$$\frac{mv^2}{r} = q |v \times B|$$

$$r = \frac{mv}{qB} \quad \text{sebességgel növekvő sugar}$$

akármilyen

$$w = \frac{v}{r} = \frac{q}{m} \cdot B$$

$w$  nem függ a sugártól

sugár pályán

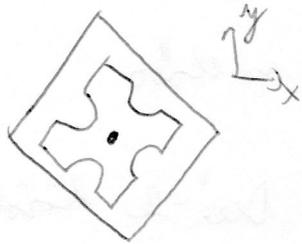
halad a részecske, ugyanabban a fázisban és a gyorsító részben

$\Rightarrow$  ugyanazzal a rádiófrekvenciával lehet gyorsítani a részecskéket

(relativisztikus sebességek már más a helyzet:  $m$  is változik)

- ciklotronnal 10 GeV energiájú nyolábok is létrehozhatók
- fénysebességhez közel a tömegnövekedés miatt  
szinkronizálni kell az RF-jelre → szinkrociklotron
- szükség van energia elérésé után kiharatal a pályánál  
(eltérítő mágnesek)
- nyolábvesztésű csőben részecskék, energia és eloszlás mérő detektorok,  
szivattyúk, mágnesek ...

↓  
kvadrupól mágnes



### - szinkrotron (≠ szinkrociklotron)

- a körpályán sugárzó állandóan tartjuk → a mágneses térrel is nőnie kell a relativisztikus tömegnövekedés kompenzálására
- az a gyorsító itt is RF oscillátor végén, ezt is szinkronizálni kell (l. szinkrociklotron)
- ~~által~~ részecskefizikai ütköző (collider) használják  
pl. CERN, LHC
- → TeV-es energiák elérése

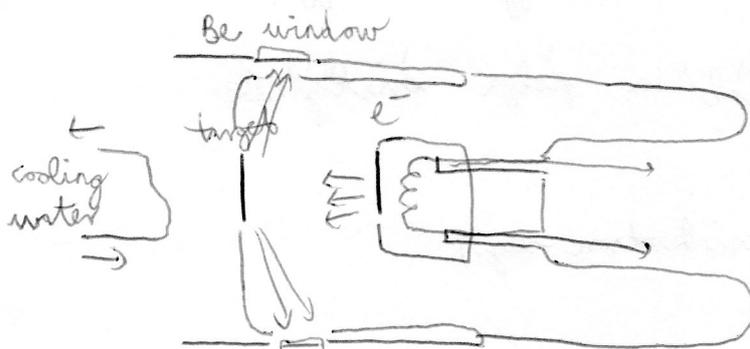
2) RTG források:

- Magyarországi RTG Cső:

- izo katód
- gyorsító fesz.: 5-8 kV
- a felgyorsított  $e^-$ -k aródnak ütköznek (aród = céltárgy (target))

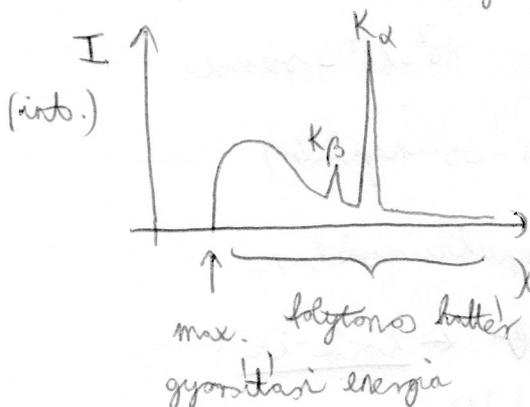
a kilepő sugárzás hullámhossza az aród anyagától függ

(pl. Cu, Mo, Ag, Cr, Rh, W)



üvegben fenntartása miatt  
↓ kell ünni

- a keletkező sugárzást el kell vezetni → Be ablakok (4db)  
(a Be RTG elnyelési tényezője kicsi)
- a betáplált energia nagy része hő formájában távozik ki → veszteség
- spektrum alakja:



→ folytonos hárter = fékbeszi sugárzás (bremsstrahlung)

→ csúcsok: karakterisztikus sugárzás  
K héjól kiütünk  $e^-$ -t,

fontos:  $K_\beta$ : nagyobb energia, kisebb valószínűség

L vagy M ( $K_\beta$ ) héjól betöltődik,

Cu  $K_\alpha$  hullámhossza:  $\lambda = 0,154 \text{ nm}$ ,  $E \sim 8 \text{ keV}$  ( $K_\alpha$ )

mikrosben kisugárzás energiát

Mo  $K_\alpha$  - II - :  $\lambda = 0,07 \text{ nm}$ ,  $E \sim 17,4 \text{ keV}$

→ a szűk sávú sugár nem a természetes vonalszélesség adja  
(az ennél kisebb ad)

## - sinkrotron sugárzás:

• gyorsuló töltött részecske → sugárzás

• intenzitás:  $I \approx \left(\frac{E}{mc^2}\right)^3$

→ ezt érdemes sinkrotronnal  $e^-$ -t vagy  $e^+$ -t gyorsítani

• az elterjedt mágnesekkel nyálaláb a pálya érintőjének irányába

RTG-sugárzás (sinkrotron sug.)



• spektrum:

→ sáv: <sup>kemény</sup> RTG (0,1 nm) → IR

→ ebből monokromátorral szűrik ki a számunkra kedvezőt

• miért hasznos a ~?

→ az intenzitás a hagyományos RTG cső  $10^2-10^4$ -szere!

→ kis divergencia  $\sim 0,006^\circ$  (készen  $\parallel$ -os nyálaláb)

→ impulzus üzeműde gyorsító → impulzusok

kapott sugárzás (zajszűrés könnyebb ← lock-in:  
feszültség erősítő)

→ nagy nyálaláb méret:  $d \sim 1-2$  cm (← RTG cső: mm-es átmérő)

→ polarizált nyálaláb (RTG-csőnél nem): a pálya síkjában 100%-osan

polarizált, a sík kívül a kúpban polarizált

### - Wiggler, Undulator

- a pálya egyenes szakasza mentén elhelyezett statikus dipól mágnes sor, irattakart irányú mág. tétel
- az  $e^-$ -ek oszcilláló pályán gyorsulnak  $\rightarrow$  sugárzás (nagyobb intenzitás, mint RTG csőnél)
- fontos param.:  $K = \frac{e B \lambda_u}{2\pi m_e c}$

$\rightarrow K \gg 1$  esetben Wiggler

- $\hookrightarrow$  széles energiaspektrumú nyálak
- $\hookrightarrow$  nagy divergencia a nyálak irányában

$\rightarrow K \ll 1$  esetén Undulator

- $\hookrightarrow$  keskeny energiaspektrum
- $\hookrightarrow$  kis divergencia
- $\hookrightarrow$  hangolható polarizáltság

### 3) Neutron források:

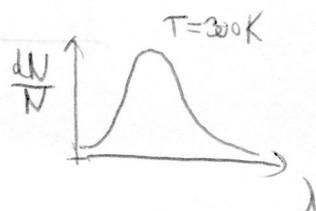
- a neutron alapulajdonságai:

- más anyaggal való kölcsönhatása során ideális gásként viselkedik, nagyis ütközések során felhősi a környezet hőmérsékletét

• sebességeloszlás: Maxwell-Boltzmann-eloszlás  $\rightarrow T$ -vel lehet a csúcs helyét változtatni!

$$m_n = 1838,65 \cdot m_e, \quad k \cdot T|_{300\text{K}} = 0,026 \text{ eV} = 26 \text{ meV}, \quad \lambda = \frac{h}{m_n \cdot v}$$

$$E = \frac{1}{2} m_n \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} kT, \quad \lambda(\text{nm}) = \frac{h}{\sqrt{2Em_n}} = \frac{0,0266}{\sqrt{E(\text{eV})}}$$



$$T = 300 \text{ K-en} \rightarrow E = 0,039 \text{ eV}$$

$\rightarrow$  ilyen a neutronok hullámhossza 300 K-en :  $\lambda = 0,145 \text{ nm}$

$\hookrightarrow$  hasonló állítás, mint RTG fotonokkal

$\hookrightarrow$  de az energia lényegesen kisebb ( $E_{\text{RTG}} \approx 8 \text{ keV}$ )

$$E_{n^0} \approx 39 \text{ meV}$$

pl. röntgenekkel ez hasonló,

mert a röntgenek energiatarományja is hasonló  $\rightarrow$  lehet vizsgálni neutronnyalábbal

• semleges, de mágneses momentummal rendelkezik!

- hasadási reaktor:

•  $^{235}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$  üzemanyag

• a reaktor közepénél a  $n^0$  fluxus  $< 10^{19} \text{ ns}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$

$\rightarrow$  a fotonokhoz képest még ez is kicsi fluxus!

$\Downarrow$

$\rightarrow$  a mérésük során a fluxust optimalizálni kell:

$\hookrightarrow$  neutron reflektorok (Ni, Be)

$\hookrightarrow$  moderátorok: különböző hőmérséklet  $\rightarrow$  a  $n^0$  átveszi ezt a hőmérsékletet

moderátor mérete kb.  $10 \text{ cm} \times 10 \text{ cm} \times 6 \text{ cm}$



ez a tartomány kell nekünk

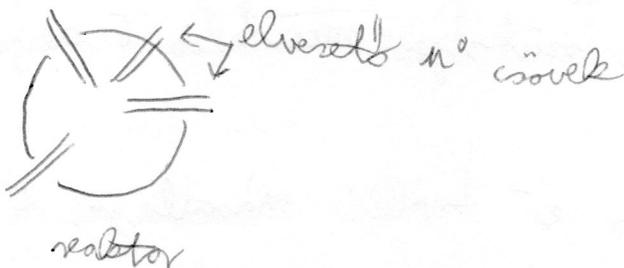
moderátor anyagok:

$n^0$ -al összemérhető tömegű legyen  $\Rightarrow$  ekkor lehet a legtöbb energiát elvesztetni

(pl. 2000K)  
 $\rightarrow$  rövid hullámhosszhoz: grafit

$\rightarrow$  hosszú - " - (20K): H, deuterium

$\rightarrow$  diffrakciós kísérletekhez 300K-es (termikus) neutronok:  
könnyű nagy nehésvíz



- spallációs neutron forrás:

• (1970-es évektől)

•  $E > 500$  MeV energiára gyorsított  $n^+$  nyaláb nehésvíz

hangya ütközők (Pb, W, U)  $\rightarrow$  magbomlás ("fellép" a mag)

• keletkezett  $n^0$ -ok energiája:  $E_n > 10$  MeV

• ezek a neutronok újabb neutronokat képesek keltetni

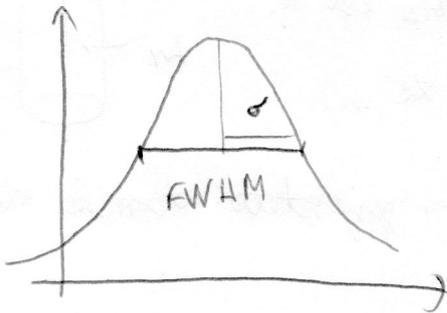
$\Rightarrow$  1 db.-ban 20-30  $\frac{\text{neutron}}{\text{proton}}$  keletkezik

• hullámhossz renití eloszlást itt is moderátor állítja be



gyakorlatban először a Poisson-eloszlástól:

$$\sigma^2 = F \langle n \rangle = F \cdot \frac{E}{\delta} \quad F: \text{Fano-faktor}$$



$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \cdot e^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}}$$

↓  
 max:  $f(m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}$   
 half max:  $\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}}$

FWHM: full width at half maximum

felértékesség  $\neq \sigma$

**[HF]** Hogyan fejezhető ki  $\sigma$ -val a felértékesség?

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} &= e^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}} \\ -\ln 2 &= -\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2} \\ \frac{(x-m)^2}{2 \cdot \ln 2} &= \sigma^2 \\ \pm \sqrt{2 \ln 2} \cdot \sigma &= x-m \\ x &= \pm \sqrt{2 \ln 2} \cdot \sigma + m \end{aligned}$$

3.9a

$$\sigma^2 = F \langle n \rangle = F \cdot \frac{E}{\delta} \quad F$$

a felértékesség:

$$\Delta n = 2\sigma \cdot \sqrt{2 \ln 2} = 2,35 \cdot \sigma$$

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\Delta n}{\langle n \rangle} = 2,35 \frac{\sqrt{F \langle n \rangle}}{\langle n \rangle} = 2,35 \sqrt{\frac{F \cdot \delta}{E}}$$

(felértékesség, „jórági tényező“)

az a jó, ha a Fano-faktor is  $\delta$  kicsi, és  $E$  nagy!

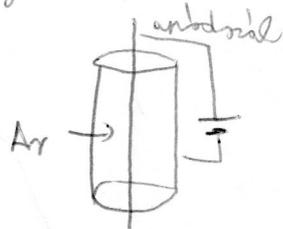
# Gásküszelők detektorok

• ionizációs kamra, proporcionális számláló, Geiger-Müller-számláló

• működési elvük:

legáltalában ezt h.

↳ aktív gáz = nemesgáz (Ar, Ne, Xe, ...)



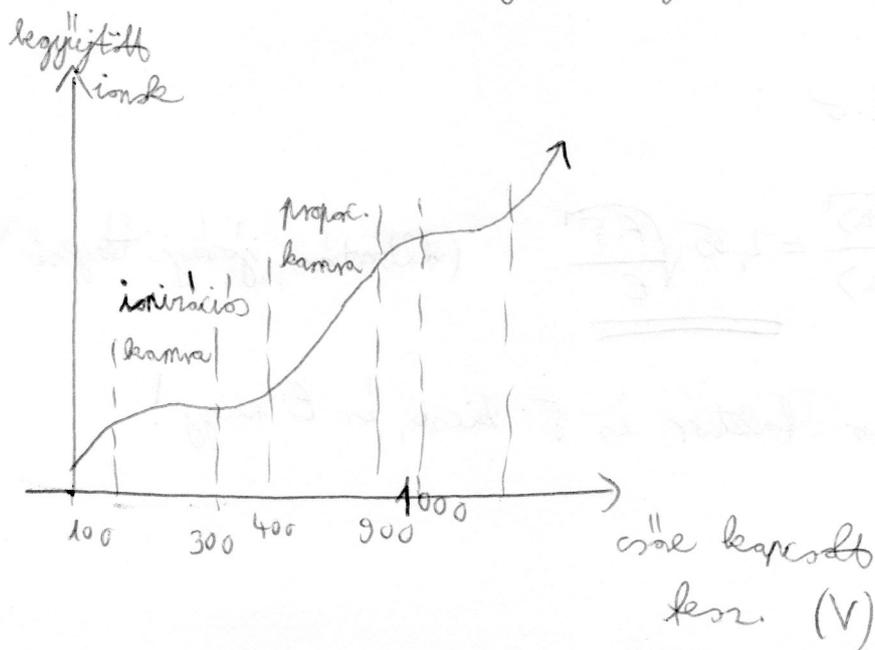
↳ "hűtő gáz" (~10%) (quench gáz): szerepe a gerjesztett atomok alapállapotba ritkulása, sok esetben metán

P10 gáz: 90% Ar, 10% metán

↳ a csőben az ionok ütköznek, röntgen lelassulnak, ezért ezek nem jöttek volna olyan jelentős szerepbe  $\Rightarrow e^-$  a fotos

a gerjesztés vagy ionizáció során az atomok kikerülnek alapállapotukból  $\Rightarrow$  újabb méréshez újra alapállapotba kell hozni őket.

Erre a  $\text{CH}_4$  jól megfelel, mert sok szabadradikál foka van  $\Rightarrow$  szűk ~ energiaszintjei



• ionizációs kamra:

- 5 ~ 25 eV, Cu K<sub>α</sub> ~ 8 keV → 300 db e<sup>-</sup> (kevés!)
- nagy fluxusú sugárzás detektálásához használjuk

• proporzionális kamra:

- az alk. ksz. fel tudja gyorsítani úgy a keletkező e<sup>-</sup>-okat, hogy azok újabb e<sup>-</sup>-okat üssenek ki
- 10<sup>5</sup> erősítés
- f ~ 1,5 ⇒ ΔE/E = 15-20%

→ miért lineáris az összelüggés? Mert a térösség nem egyenletes a csőben, mivel nagyobb a ksz., annál nagyobb sugárban lehetőség másodlagos e<sup>-</sup> képzés

→ háttér:

- lerakott cső, folyamatos gáz immutálás
- ~~Be~~ Be ablak → kis RTG elnyelés

→ RTG, γ detektálás + töltéssel rendelkező részecskékre  
 ↓ ↓  
 e<sup>-</sup> képzés mag

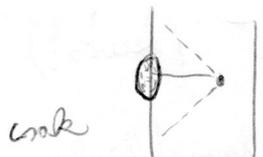
→ n<sup>o</sup> det.: <sup>3</sup>He vagy <sup>10</sup>Bf<sub>3</sub> töltőgáz → magreakciók → radio. termékek (kin. energiával ionizál)  
 → ilyenkor az en. információ elveszik!

• pozitronkényg gáztöltésű detektor (PSD: pos. sensitive det.):



mindkét végén detektor → töltésmennyiségből helymeghat. (Q ~ megtett út)  
 → időből helymeghat.

→ kuralkamra: egymással  $\parallel$ -os kuralokkal. 2D  $\rightarrow$  pozíció meghat.



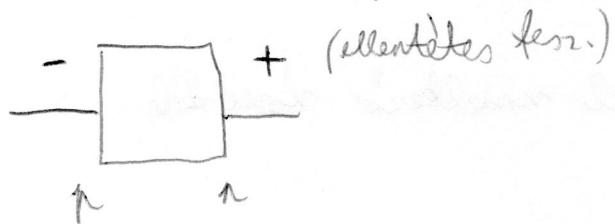
egy helyen történik kaskád (a szálhoz közel nagy csök a terjedés)

• Geiger - Müller - sz.:

- 1000V fesz. → a gáz egésze ionizálódik
- energia információ elvesz (!), de mégis a detektor eseményérzékenysége
- nagy holtidő:  $\Delta t = 100 - 200 \mu s$   
(amíg a detektor alapállapotba kerül vissza)

- Felvezető detektorok

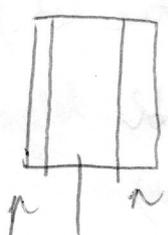
• ált. ban Ge vagy Si egykristály



nincs kiüresített réteg jön létre (aktív réteg)

• bejövő rész:  $e^-$  - lyuk pár keletkezés

⇒ akkor jó a det., ha alapjában nincs szabad töltéshord.



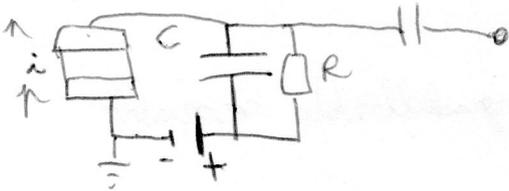
pin dióda

i (intrinsic) réteg

↓  
nagy tisztaság kell → Li - al kezelik (diffundál → -200°C-on kell tartani (foly. N))

ma már nem kell Li-al kezelni a diódot, mert elég nagy tisztaságot tudnak elérni: HPGe, HPSi  
(high purity)

(ma is lehetnek kitermi, de csak a zaj miatt  $\sim -60^\circ\text{C}$ -ra)



- az összegyűjtött töltésmennyiség a kimeneti kond.-on lesz impulzus hoz létre

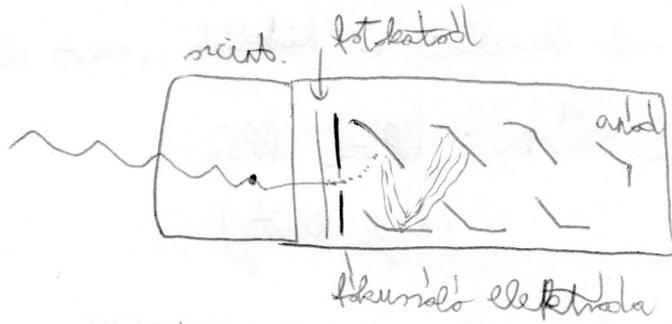
$\Delta \sim 3-4 \text{ eV} \rightarrow$  kicsi  
↓

$$\text{kis } \frac{\Delta E}{E_0} \approx 1-5\%$$

$$(\text{HPGe, HPSi } \frac{\Delta E}{E_0} \approx 1\%)$$

## Szintillációs detektorok

- anyaga leggyakrabban: NaI kristály, amelyet Ta atomokkal szennyeznek
- RTG vagy  $\gamma$  fotonok hatására ~~Ta helyén~~  $e^-$ -lyuk párok keletkeznek, de nem válnak szét, hanem adott táv.-on belül maradnak (excitációk), és Ta helyekre <sup>eljutva</sup> gerjesztik a Ta-at
- ~~hagy~~ (foton) bocsát ki
- ezeket a fotonokat fotoszorzóval (PMT: photomultiplier tube) dolgozza fel: gyorsított elektr. hatására a sírból több újabb elektront is lehet le



• szorzási faktor:  $10^4 - 10^5$

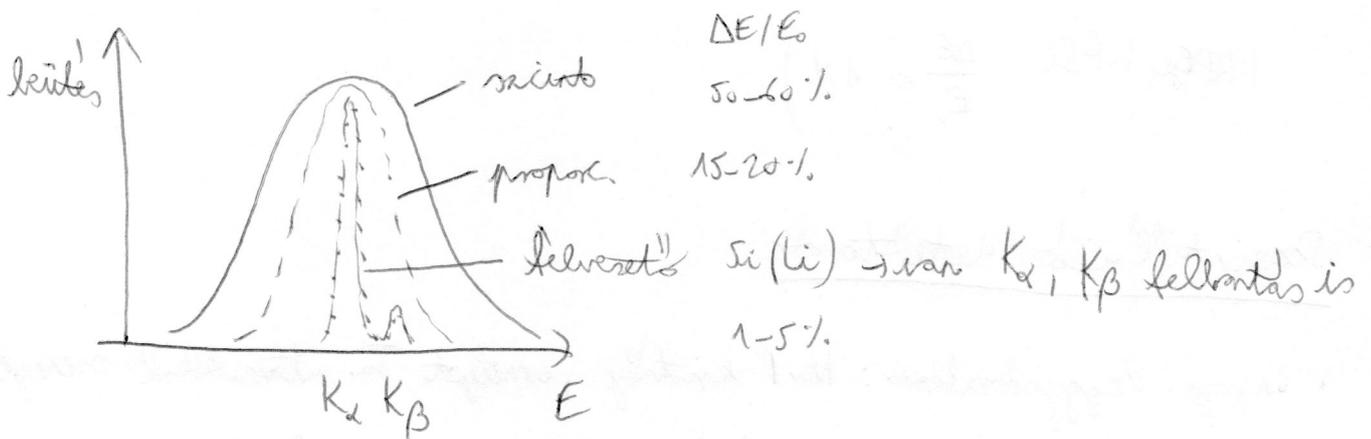
•  $F \sim 1$

• a soklépcsős átalakulás miatt az energiateljesítmény rosszabb

$$\frac{\Delta E}{E_0} \approx 50 \sim 60\%$$

⇒ de nagy érzékenység, és alacsony energiát is lehet mernyezni  
menni vele

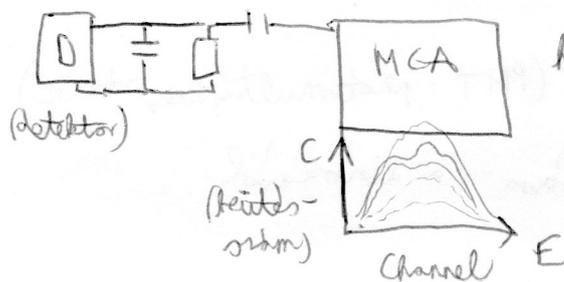
- pl.: Mn  $K_{\alpha}$  vizsgálatakor detektálás 3féle detektorral:



↳ Szecsatornás analizátor (MCA: multi-channel analyzer)

- detektorok után van:

$$E \sim I \Delta t \text{ (impulzus)}$$



histogramképes eszköz: rámondja, hogy adott energiacsatornában hány impulzus (leütés) jön

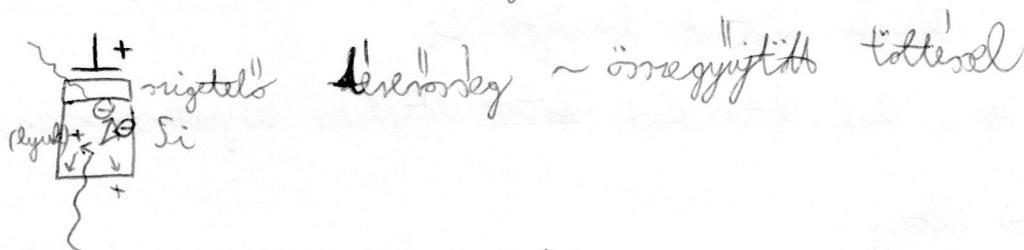
# c) Képképes detektorok

Bell elővárosi fázis is, nem  
↑ sokkal látható

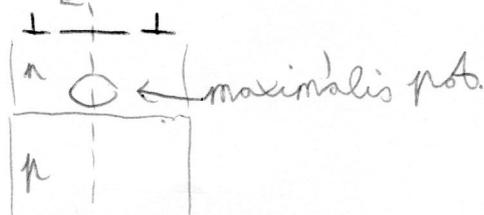
- korábban használt ~:
  - erüst-halogénidél (AgBr) bevonat film (off-line detektálás)
  - (karna felt ← beütés)
  - Zn S Ni-el kezeve fluoreszcens tulajdonságú, RTG fotónak hatására zöld fény (on-line detektálás)
- újabb eszközök 2D detektálásra:
  - CCD
  - imaging plate

## - CCD (Charged Coupled Device: töltéscsatolt eszköz)

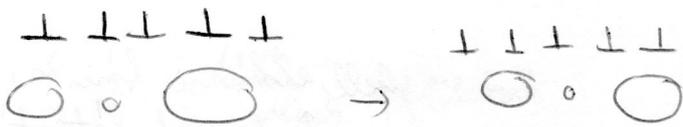
- 1970-es években Bell laboratóriumban hozták létre
- fotóadás, csillagászatban és fotónak (RTG,  $\gamma$ ) 2D rögzítésében is jelentős szerepet játszik
- nagyszámú MOSFET elemből áll
- 1 pixel 3 kapu elektrodára alakítja



- működés: nem engedik, hogy átmenjenek a szomszédos töltések



- működés: a belső pixelket kitétik a szomszédos elektrodára (a max. feszültséget arra teszik)



elektroda  
 a négy egy ~~elektroda~~ kideressa  
 ↓  
 összehalítja a 20 képet

• legnagyobb CCD wafer:

2008 ~ 15 cm x 15 cm felület

2011 ~ 20 cm x 20 cm felület (16 MP felbontás)

### - imaging plate:

• filmdetektor helyett használják 1980-as években

• kb 0,5 mm vastag, hajlítható polimeres lemeze felületén fényérzékeny réteg  
 látható kép keletkezik ✓

• mechanizmus:

BaBrF: Eu<sup>2+</sup> nemideálisól kell

→  $\text{Eu}^{2+} \rightarrow \text{Eu}^{3+}$  (ionizáló foton hatására)

→ az e<sup>-</sup> vezetési szoba körül, majd bromid vakanción

(F centrum, színt centrum) fogódik be

→ He-Ne lézer hatására az F centrumokból az e<sup>-</sup> vissz

megy az Eu ionokhoz ( $\text{Eu}^{3+} \rightarrow \text{Eu}^{2+}$ ), és közben kik

fényű fotonok keletkeznek

→ a kel. fotonokat fotomultiplier megérkezőszozza

} explicit  
 } kiderítés

• elbony:

sokkal nagyobb felbontás (6000 x 5000 pixel)

Diffrakciós mérések1) Főbb tulajdonságok:

a) az anyagok a reflexiók jellemző tulajdonságokkal (pl. visszaverődés) kisebb hullámhosszú hullámot bocsátanak

b) Fraunhofer - interferencia (párhuzamos sugarak)  
interferenciája a  $\infty$ -ben

• a lemez fókusz síkjában jelenik meg a kép

• interferenciakép: szórtás (elhajlás) + interferencia

c) visszaverődés:  $94 - 0,6 \text{ nm} \Rightarrow \lambda < 0,2 \text{ nm}$

$\Rightarrow$  RTG,  $n^0$  és  $e^-$  hullámok megfelelőek

(de a szórt mechanizmusa a háromféle hullám esetén különböző)

a szórtól eltérő körös egyenesített elmélettel (kinematikus modell) leírhatóak

2) Kinematikus elmélet (modell):a) közelítő feltételek:

- a szórt sugarak: a szórt hullám energiája nem változik, vagyis a  $\lambda$  hullámhossz a folyamat során nem változik

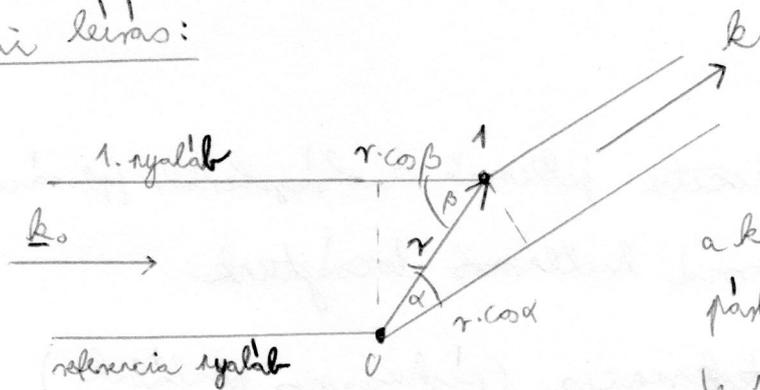
- a szórt koherencia: a szórt valamennyi szórt centrumon ugyanúgy megy végbe (pl. Thomson-szórt koherencia, a Compton nem!)

(pl. lehet fázisváltozás a szórtásonál, de minden szórt centrumon ugyanakkora)

- a szórás gyenge:

- nem kell többszörös szórásokkal számolni (kicsi a valósz.-e)
- ~ mint a vastagságra mentén a nyaláb intenzitása nem változik

b) geometriai leírás:



• szórócentrumok

a kimenő nyalábokat párhuzamosnak vesszük, de valójában metszik egymást néges távolságokon belül (de  $\lambda$ -hoz képest ez a távolság nagyon nagy)

$$A(\underline{k}_0) = a_0 \cdot e^{i(\omega t - \underline{k}_0 \cdot \underline{x} + \delta_0)}$$

$$\underline{k}_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \underline{e} \quad |\underline{k}|=1, \quad \omega = \frac{2\pi}{T}$$

• Az 1. nyaláb és a ref. nyaláb közötti fázis:

$$\underline{k}_0 \cdot \underline{r} - \underline{k} \cdot \underline{r} = -\Delta \underline{k} \cdot \underline{r} = \Delta \underline{k} := \underline{k} - \underline{k}_0$$

$$= \delta = \frac{2\pi}{\lambda} (r \cos \beta - r \cos \alpha)$$

• A ref. nyalábbal kijerave az 1. szórócentrumról haladó nyaláb:

$$A(\underline{k}) = a_0 \cdot e^{i(\omega t - \underline{k} \cdot \underline{x} + \delta_1 + \delta)} =$$

$$= A_0 \cdot e^{i\delta} = A_0 \cdot e^{-i\Delta \underline{k} \cdot \underline{r}}$$

$$\delta_1 = \underbrace{\delta_0}_{\text{keretdi fázis}} + \underbrace{\delta_{\text{szórás}}}_{\text{szórás során felvett fázis}}$$

Mivel  $A_0$  állandó,  $A_0 := 1$

(valójában ez sem igaz, mert  $A_0$  függ  $k$ -től,  $r$ -től, ...).

$$A(\underline{k}) = \sum_j e^{-i\Delta \underline{k} \cdot \underline{r}_j} \sim \int_V \rho(\underline{r}) e^{-i\Delta \underline{k} \cdot \underline{r}} d^3 \underline{r} \quad (\text{Fourier-transzformált})$$



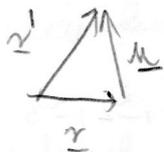
V: a nyaláb által ért térfogat

$\rho$ : szórócentrum sűrűség (pl. neutronok magokon szóródások)

intenzitás méjűk

$$I = |A(k)|^2 = A^*(k) \cdot A(k) = \int_V \int_{V'} \rho(r) \cdot \rho(r') \cdot e^{i\Delta k \cdot r} \cdot e^{-i\Delta k \cdot r'} d^3r d^3r'$$

— helyadékok és anyagok:



$$\underline{r'} = \underline{r} + \underline{u}$$

$$d\underline{r'} = d\underline{u}$$

$$\downarrow \\ d^3r$$

$$I = \int_V \int_{V_u} \rho(r) \cdot \rho(r+u) \cdot e^{-i\Delta k \cdot u} d^3r d^3u$$

• autokorrelációs függvényrel:

$$P(u) = \int_V \rho(r) \cdot \rho(r+u) d^3r$$

↓

$$I = \int_V P(u) e^{-i\Delta k \cdot u} d^3u$$

$I_2$  intenzitás az autokorrelációs fr. Fourier-transzformáltja!  
(és anyagoknál)

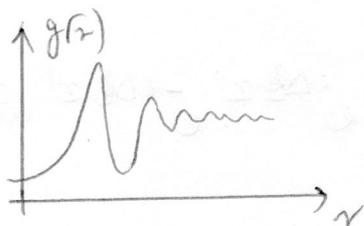
• helyadékoknál ennél tovább nem lehet menni

•  $I$ -t méjűk  $\Rightarrow P(u) \Rightarrow$  mit fejez ki az autokorr. fr.?

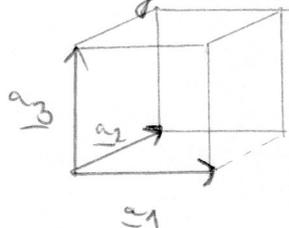
$P(u)$  akkor nem 0, ha  $\rho$  az  $r$  és  $r+u$  helyen nem 0!  
(mindkét helyen van szilícium)

• Isotrop esetben elég az autok. fr. 1D vetületet használni,  
amit  $\rho(r)$  radialis eloszlásfr.-nek nevezünk

amoly anyag eseten a radialis eloszlás, megmutatja az első és második, ... számúak legelőször helyét



— kristályos anyagok:



cellát meghatározó vektorok:  $a_1, a_2, a_3$   
(nem egyenlő hosszúk)

(legkisebb ilyen térfogatú cella = elemi cella)

• elemi vektorokkal a rács pontjait

$$r = x \cdot a_1 + y \cdot a_2 + z \cdot a_3 \quad \text{vektor adja meg, ahol } x, y, z \text{ egész számok}$$

(nem elemi vektorokkal  $x, y, z$  nem feltétlenül egész számok)

(a Bravais - cellák nem mindig elemi cellák!)

• kristályszerkezet = rács + bázis!

bázis lehet 1 atom, de lehet több is, pl. NaCl, kén, ...

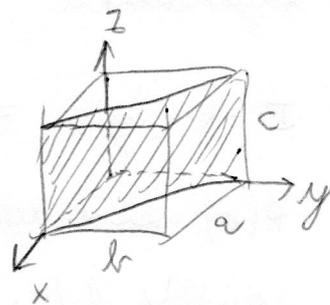
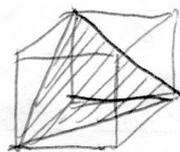
gyémánt (az is lapcentráltság, 2 szomszédos bázissal)

• kristálysíkok jellemzése: Miller-indexek

→ sík hol metszi a vektorokat, pl.

$$\text{metszéspontok: } 1, 1, \infty \Rightarrow (hkl) = \left( \frac{1}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{\infty} \right) = (1 \ 1 \ 0)$$

$$\text{vagy } -1, \infty, \frac{1}{2} \Rightarrow (1, 1, 1) \rightarrow (\bar{1} \ 0 \ 2)$$



→ úgy választjuk meg a sík, hogy egész számok legyenek (hkl)-ek!

• reciprok vektor:

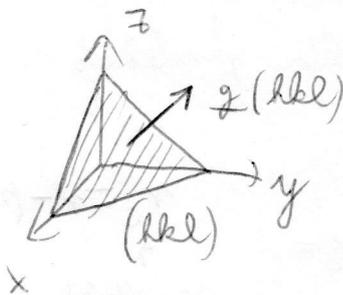
$$b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1(a_2 \times a_3)} ; b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_2(a_3 \times a_1)} ; b_3 = \frac{a_1 \times a_2}{a_3(a_1 \times a_2)} \cdot 2\pi$$

↓  
 belátható:  $a_i \cdot b_j = 2\pi \cdot \delta_{ij}$   $[g] = \frac{1}{\text{hosszúság}}$

•  $g$  reciprok vektor:  $g = h \cdot b_1 + k \cdot b_2 + l \cdot b_3$   $h, k, l$  elvileg  
 tetszőleges,

de ha a Miller-indexet írjuk:

→  $g(hkl) \perp$  lesz a  $(hkl)$  síkra!



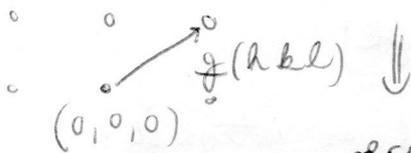
(biz.: merőleges a sík két „lételvektorára”  
 (képer.) )

→  $(hkl)$  valójában egy síkcsoporth jellemző:

legközelebbi lévő sík távolsága  
 (középső)

$$\frac{2\pi}{|g|} = d_{hkl}$$

→  $g$  a reciprok vektor mértékét is meghatározza



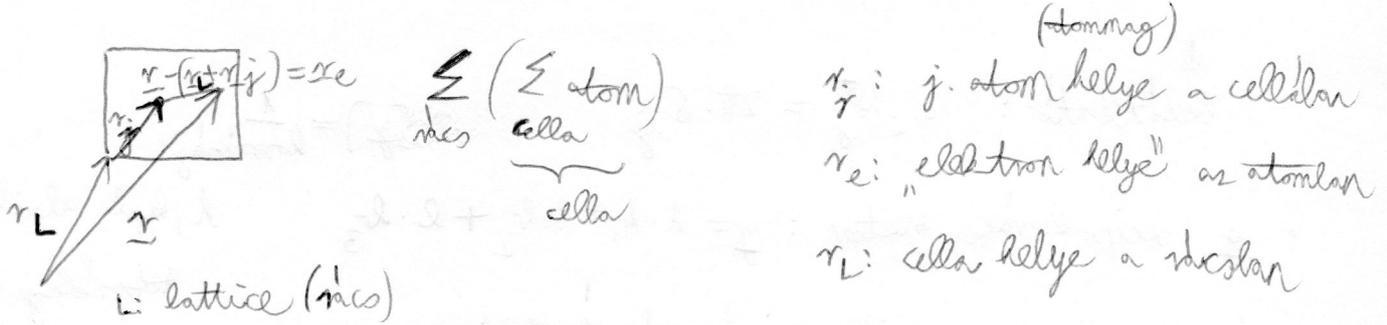
→ a reciprok vektor pontjai a síkcsoporth jellemzői!  
 de a síkcsoporth minden felületénél atomok ⇒ a reciprok vektor

pontjai lehetnek lyukak is, hogy nincs nekik nyitva atomok,  
 hanem félre, harmadold, ... pontokat jelképeznek a

rendszerben (mivel ha egy reciprok vektor pontján atom van ⇒ a  
 2-szeres távolságra is van reciprok vektor, ami a síkcsoporth a felületén)

• Bragg-feltétel:

kibontadjuk a transzlációt: a kristály felbontható cellákra,  
a cellák pedig a hozzájuk tartozó atomjára



az integrált is felbontjuk: először atomként vizsgáljuk el az  
integrálást, majd összeradjuk a cellában található atomok járulékait,  
végül összeradjuk az összes cella járulékait

atomi formafaktor:

$$f_j(\Delta k) = \int_V \rho_j(r_e) \cdot e^{-i\Delta k \cdot r_e} d^3 r_e$$

$r_e = r - (r_L + r_j)$   
 $r$   
 $e$ : elektron(hely)

$$= \int_V \rho_j(r) \cdot e^{-i\Delta k \cdot r} d^3 r$$

← ez nem ugyanaz az  $r$ !  
 (csak  $r_e$  -t jelöltük  $r - r_e$ )

↑  
 ehhez az  $e^-$  sűrűsége  
 kell a mag körül

5.óra

c) az amplitúdóintegrál felbontása (kristályos anyagok)

$$A(\Delta k) = \int_V \rho(r) e^{i\Delta k \cdot r} d^3 r \rightarrow \text{felbontjuk az integrált:}$$

először az elektronok sűrűsége sűrűségét számítjuk ki 1 atomra (atomi  
formafaktor), majd az atomokra 1 cellában, majd a cellákra

$$f_j(\Delta k) = \int_V \rho_j(r_e) \cdot e^{-i\Delta k \cdot (r - (r_j + r_L))} d^3 r_e$$

-26-

$$A(\Delta \underline{k}) = \sum_{l=1}^N \sum_j e^{-i \Delta \underline{k} \cdot \underline{r}_l} e^{-i \Delta \underline{k} \cdot \underline{r}_j} \int \rho(\underline{r}) e^{-i \Delta \underline{k} \cdot (\underline{r} - (\underline{r}_j + \underline{r}_l))} d^3 r$$

cellák összegzése

$$f_j = \int \rho(\underline{r}) e^{-i \Delta \underline{k} \cdot \underline{r}} d^3 r$$

atómi formafaktor

$$A(\Delta \underline{k}) = \sum_{l=1}^N e^{-i \Delta \underline{k} \cdot \underline{r}_l} \cdot \sum_j f_j e^{-i \Delta \underline{k} \cdot \underline{r}_j}$$

$$F(\Delta \underline{k}) = \sum_j f_j e^{-i \Delta \underline{k} \cdot \underline{r}_j} \quad \text{strukturális tényező}$$

$$A(\Delta \underline{k}) = \sum_{l=1}^N F(\Delta \underline{k}) \cdot e^{-i \Delta \underline{k} \cdot \underline{r}_l} \quad (\text{nem függ } \underline{r}_l \text{-től})$$

### ■ Strukturális tényező:

- függ a cella választásától

(elemi cella: legkisebb területegység, melyet eltolva megkapjuk a másolat)

#

Bravais-cella: ezen jobban látnánk a szimmetriát, de nem mindig elemi cella)

### ■ Rácsösszeg

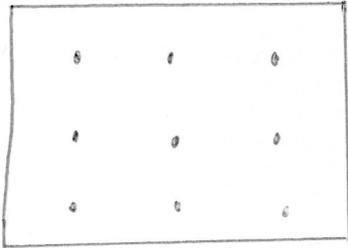
$$- A(\Delta \underline{k}) = \sum_{l=1}^N \underbrace{F(\Delta \underline{k})}_{F_{lkl}} \cdot e^{-i \Delta \underline{k} \cdot \underline{r}_l} = F_{lkl} \cdot \underbrace{\sum_{l=1}^N e^{-i \Delta \underline{k} \cdot \underline{r}_l}}_{\text{rácsösszeg}}$$

ideális rács esetén  $N = \infty$

$\Rightarrow$  a rácsösszeg akkor különösen 0-tól, ha a kitevőben  $2\pi n$  szerepel (egyként a  $\sum = 0$ -t ad)

$$\sum_{l=1}^N \underbrace{e^{-i2\pi l}}_1 = N(\infty) \quad n \in \mathbb{Z}$$

→ ilyenkor  $\infty$  nagy intenzitású kárpok elbolyg



- akkor van a kiterésben  $2\pi \cdot n$ , ha  $\Delta \underline{k} = \underline{g}$  Bragg-feltétel

ha  
 mis:  $\Delta \underline{k} \cdot \underline{r}_L = \underline{g} \cdot \underline{r}_L = (h \underline{b}_1 + k \underline{b}_2 + l \underline{b}_3) \cdot (x \cdot \underline{a}_1 + y \cdot \underline{a}_2 + z \cdot \underline{a}_3) =$   
 $(h, k, l, x, y, z \in \mathbb{Z})$

$$= 2\pi (hx + ky + lz)$$

↑  
 $n \in \mathbb{Z}$

$$a_i b_j = 2\pi \delta_{ij}$$

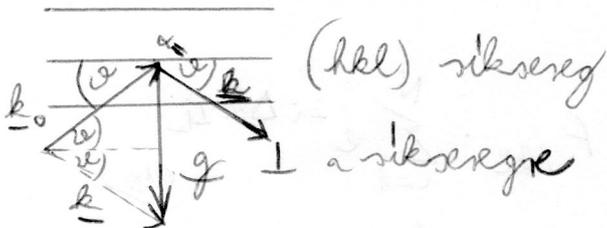
(belátható, hogy más esetben nem kapható  $2\pi \cdot n$ )

$$f_j = \int \rho_j(\underline{r}) e^{-i \Delta \underline{k} \cdot \underline{r}} d^3r \quad \text{atomi formaf.}$$

$$F_{hkl} = \sum_j f_j e^{-i \underline{g} \cdot \underline{r}_j} \quad \text{rek. tenyész}$$

$$A_g = N \cdot F_{hkl}$$

} Bragg-felt.



$|k_0| = |k| \Rightarrow \alpha = \vartheta \rightarrow$  tényleg ugyan mintha tükrözés lenne vissza

$$\sin \vartheta = \frac{|g_{hkl}|}{2|k_0|}$$

$$|g_{hkl}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}} \quad k_0 = \frac{2\pi}{\lambda}$$

↓

$$2d_{hkl} \sin \vartheta = \lambda$$

est olyan  $h'k'l'$  síkokra is felírhatjuk, ahol nincsnek atomok

$$d_{hkl} = d_{h'k'l'}$$

$$\Rightarrow 2d_{h'k'l'} \sin \vartheta = \lambda$$

$$\boxed{2d_{hkl} \sin \vartheta = n \cdot \lambda} \quad \text{Bragg-felt. másod. alakja}$$

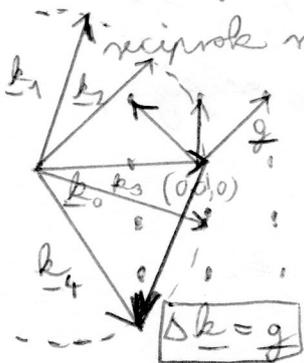
$$g(\vartheta) = ?$$

$$\sin \vartheta = \frac{|g_{hkl}|}{2 \cdot \frac{2\pi}{\lambda}}$$

$$\boxed{|g_{hkl}| = \frac{4\pi \cdot \sin \vartheta}{\lambda}}$$

A Bragg-feltétel szerkesztés: Ewald-szerkesztés

reciprok rács (hkl Miller-indexekkel jellemezhető)

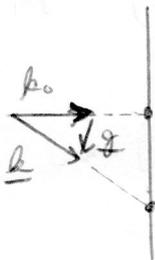


láttuk, hogy akkor van maximum, ha

$g$  egy reciprok rácspontba mutat

Ewald-gömb

↓  
 $k_4$  irányban teljesül a Bragg-feltétel



difrakciós maximum

általában nem biztos, hogy a Bragg-felt. teljesül

↳ ilyen módon kellene, hogy teljesüljön

## ■ atomi formafaktor:

$$f_j(g) = \int_V \rho_j(r) \cdot e^{-i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}} d^3r \quad (\text{Bragg-feltételrel} \rightarrow \Delta\mathbf{k} = \mathbf{g})$$

-  $\rho_j$  sűrűség:

- a RTG forrása az  $e^-$  felhőn szóródás!  $\Rightarrow$  ilyenkor  $\rho_j \sim j.$  atom elektronjainak sűrűsége (dimenzió:  $1/\text{térfogat}$ )  
 $\hookrightarrow$  ezt ki tudjuk elméleti módszerekkel számolni
- $e^-$ -ek az atommagok és elektronok Coulomb-potenciáiban szóródnak  $\Rightarrow$  a szócentrum sűrűsége 2 tagból áll, amelyek arányosak az  $e^-$ -ek és a mag Coulomb-pot.-al
- $n^o$ -ok a magokon szóródnak (első közelítésben), ezért  $\rho_j$  a magsűrűséggel arányos, amely a  $j.$  mag helyén egy  $\delta$  (Dirac-delta) fvk. (és is köhérszórás, de itt van  $\pi$  fáziseltolás) (de van mágneses momentuma is  $\rightarrow$  az az  $e^-$  felhőnek is van eredő  $-||-$  (ferromágneses anyag), akkor  $\rho_j$  megváltozik!)

## ■ Szerkezeti tényező gyakorlati számolása

$$F_{\text{szel}} = \sum_j f_j \cdot e^{-i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}_j} = \sum_j f_j \cdot e^{-i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)} \quad \begin{pmatrix} x_j \\ y_j \\ z_j \end{pmatrix} \text{ a rácspont koordinátái}$$

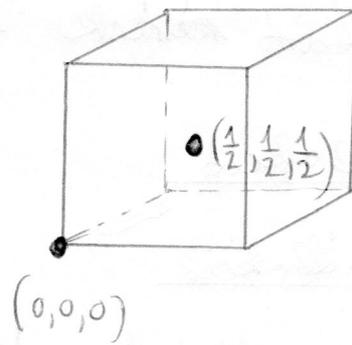
Ha Bravais-cellát veszünk, nem egy atom (rácspont) van

pl. FCC (középponti közből) nincs ekkor 2 azonos atom van,

melyek koordinátái:

$$x_1 = y_1 = z_1 = 0$$

$$x_2 = y_2 = z_2 = 1/2$$



⇓

$$F_{hkl} = f \cdot \left( e^{-\pi i(0+0+0)} + e^{-\pi i(h+k+l)} \right) = f \left( 1 + (-1)^{h+k+l} \right)$$

$$\Rightarrow F = 2f \quad \text{ha } h+k+l = \text{páros}$$

$$F = 0 \quad \text{ha } h+k+l = \text{páratlan}$$

⇓

Még akkor sincs mindig intenzitásmaximum, ha a Bragg-feltétel teljesül = szisztematikus kioltás (Bragg-f. telj., de mégis kioltás van)

[HF] FCC-n kisimodni (4 atom) a szisztematikus kioltás

⇒ szisztematikus kioltás miatt bizonyos irányok

hiányoznak, pl. (100), (210) ... középponti közből

⇒ a szisztematikus kioltás fontos információt hordoz

• Általában  $F$  nem szép egész szám  $\neq f$ , hanem van valami

faktor is

→ OE mi csak  $|F|^2$ -et tudunk mérni, a faktor elvész

a szerkesztés meghatározásánál erre a faktor is szükség lenne →

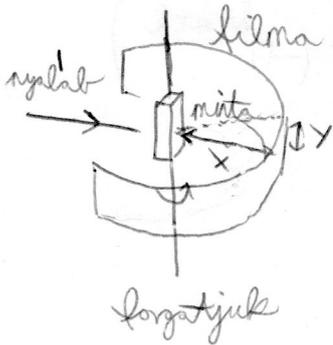
$$A(\mathbf{k}) = N \cdot F_{\text{hkl}} = \int_V \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}$$

ha amplitúdót mérünk  $\xrightarrow{\text{Fourier-tr.}}$   $\rho(\mathbf{r})$  (est akárjukt meghatározni)

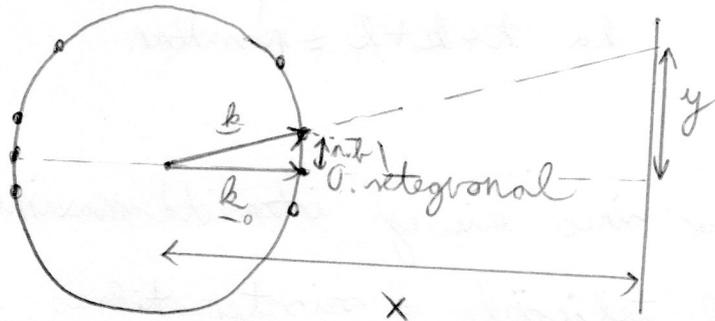
### 3) Egykristály diffrakció

#### a) Forgókristály diffrakció

- Monokromatikus nyálalót használunk



- egy reciprok rács-sík 1-1 pontján tudja metszeni az Ewald-gömböt  $\rightarrow$  integrál



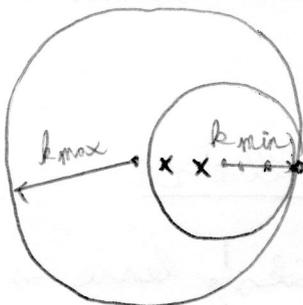
a minta távolsága az emýddel

$$\frac{\lambda n b}{2\pi} = \frac{n \cdot b}{k} = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \rightarrow n \cdot b = \text{a integrál távolsága}$$

a 0. integrállal  $\rightarrow$   $\boxed{b}$

#### b) Laue-módszer

- polikromatikus RTG-hullám: van egy legkisebb és egy legnagyobb hullámhossz



a két gömb között folytonosak a gömbök

$\Downarrow$

a két gömb közötti össes pontból (x) diffrakciós pontot kapunk!

→ a kép pontjai általában hiperbolákon helyezkednek el, vagy ha ~ pontsor áll meg a középpont <sup>alkot</sup>, egyenes mentén.

Ebből meghatározható a kristály orientációja

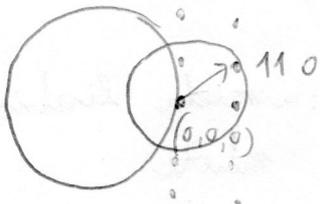
(másképp egy képsor hasonlítunk össze a diffrakciós képpel → orientáció)

### 6. óra

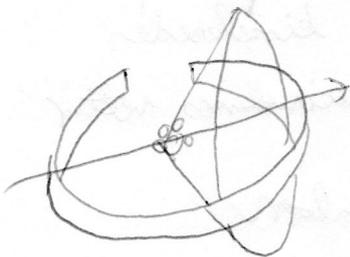
#### 4) Polikristály diffrakció (porműszer)

- a)
- a minta por állapotú, vagy kis szemcséjű polikristály
  - a nyílaló monokromatikus

Ewald-gömb

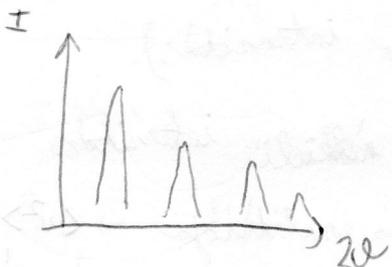


reflexiók kép kialakulásáért felelős



a kül. reflexiók pontokhoz tartozó sugarú körök a filmet íveken metszik.

a kép nyílalásszöge  $\theta$



## b) a polikristály diffrakció jellemzése

- a polidiffrakció intenzitása csak a Bragg-feltétel alapján jellemezhető lenne

⇓

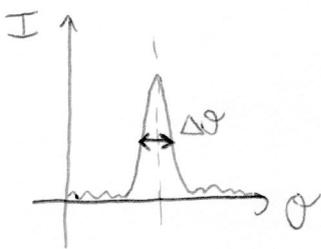
- a csúcs alakját és magasságát befolyásoló tényezők:

- természetes vonalkélesség

- elhajlás a berendezés reszein

- a detektorok vonalkélességi hatása

- a minta mérete: ha nem  $\infty$  nagy a kristály, a reszösszeget véges nagy  $N$ -re el kell végezni ( $\rightarrow 27.$  old)



$$\sum_{L=1}^{N \ll \infty} e^{-i \frac{\Delta k \cdot r}{g} L} = \dots$$

$$\Delta \varphi = \frac{\lambda}{L \cos \theta}$$

$L$ : a minta lineáris mérete

$\theta$ : elhajlási szög

$\Delta \varphi$ : kiterjedés

$g$ : reciprokális vektor

$\Rightarrow$  a diffrakció csúcs szélességéből lehet következtetni a szemcsé méretére!

- a kristály homogenitása: rezgés, nincs nyugalom

a fononvibrációk következtében a vonalak szélessége nem változik, de csökken az intenzitás!

(a hőtérhez adódik a csúcsokból hiányzó intenzitás)

$$\underline{I_{hkl} = I_0 \cdot e^{-\frac{1}{3} \langle u^2 \rangle g^2}}$$

$I_0$ : homogén nélküli intenzitás

$u$ : fononmódus amplitúdója  $\rightarrow \langle u^2 \rangle$  kontinuus számolásból

$$\frac{1}{3} \langle n^2 \rangle g^2 = 2W$$

$e^{-2W}$ : Debye-Waller-faktor

az amplitudó függ<sup>re</sup> a hőmérséklettől és a kitesérségtől (nyúlástól)

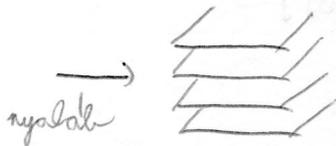
pl. Ni esetében  $e^{-2W} = 0,88$

Pb  $e^{-2W} = 0,52$

A Mössbauer-határ-faktor ugyanez a faktor, csak  $\gamma$ -fotónok diffrakció esetén!

### 5) A röntgendiffrakció sajátosságai

a) nem Debye-Scherrer-elv alapján működik, hanem Bragg-Brentano-elrendezés használunk  
 ↓  
 detektort mozgathatjuk



Soller-rés: csak párhuzamos nyalábot enged át



Bragg-eltétel alapján a különböző síkokból kapunk visszaverődést

de szűkítést helyett többféle  $d$  is van

ezekhez különböző  $\theta$  tartományok

lencsék (apertúra)

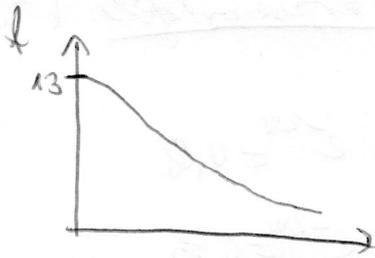
a mintát  $\theta$ -val forgatjuk, az kép  $2\theta$ -t fordít el

fontos, hogy a minta síkja a kör középpontján legyen!

b) A formafaktor általánosan:  $f_j(\vartheta) = \int_V \rho_j(\underline{r}) \cdot e^{-i\vartheta \cdot \underline{r}} \cdot d^3\underline{r}$

elektron-sűrűség (hullámszám<sup>2</sup>)

RTG-fotónak esetén az atomi formafaktor:  $\uparrow$



az integrál csak  $|q|$ -tól függ

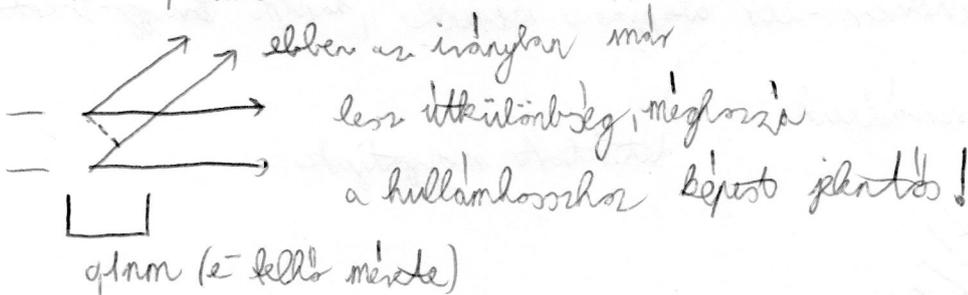
pl. Al - m  $|q| = \frac{4\pi \sin \vartheta}{\lambda} \sim \frac{\sin \vartheta}{\lambda}$

$f_j(0) = Z = \int_V \rho_j(\underline{r}) d^3\underline{r}$

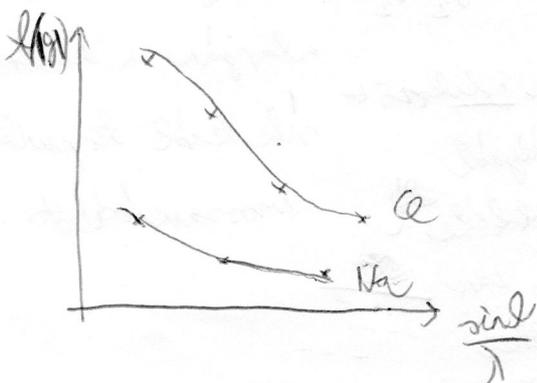
(neutronszám)  
e<sup>-</sup> szám

Miért csökken  $f$ ?

$\lambda \sim 0,1 \text{ nm}$



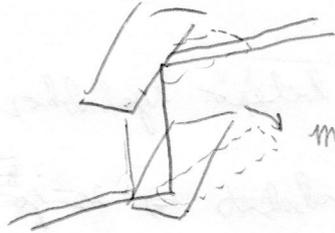
DE magiszorás esetén 5 nagyságrenddel nagyobb a hullámhossz,  
mért az útkülönbség  $\rightarrow$  nincs lényeges fáziskülönbség  $\rightarrow$  kisebb  
csökkenés



### c) hátrányok:

- alacsony rendszámú elemek nehezen vizsgálhatóak (Lamafaktor alacsony) →  
→ neutrondiffrakció
- a RTG csőek intenzitása sokszor nem elég → szinkrotron sugárzás,  
de ezt monokrómátorral ki kell szűrni

→ pl. egykristály (Ge) monokrómátor



magadjuk a lemezeket

- ↳ jó monokrómátikus sugárzás
- ↳ kis intenzitás (szinkrotron sugárzás esetén ez nem olyan nagy baj)

→ HOPG = highly oriented pyrolytic graphite

a kristályok kis orientációval vannak el egymástól

↳ az intenzitás kevésbé csökken

↳ de kevésbé lesz monokrómátikus a sugárzás

### 6) Neutrondiffrakció sajátosságai

a) hullámhossz:  $\lambda = \frac{h}{p}$ ,  $E = \frac{3}{2}kT = \frac{p^2}{2m_n}$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3kTm_n}}$$

$$T = 300 \text{ K} \text{ -en } \lambda = 0,145 \text{ nm}$$

fonon-spektrométerrel is megalmatlan vizsgálással lehet mérni!

b) független a lamafaktor (neutron magokon szóródik) ⇒ az utóhossz  
különbség kicsi  $\lambda$ -hoz képest ⇒ nincs jelentős szögfüggés)

c)  $n^{\circ}$  abszorpció és szórási hatáskeresztmetszetek nagyságrendekkel alacsonyabbak, mint RTG diffrakció esetén  
 $\Rightarrow$  a minták jóval nagyobbak (hatáskeresztmetszetek miatt)

d) szögfüggő formafaktor = szórási hossz (L)

$$F_{\text{hkl}} = \sum_j b_j e^{-i\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_j} \quad ; \text{vektoros távolság}$$

b nagyságrendje:  $10^{-12}$  cm

e)  $\pi$  fázistolásot szenved a  $n^{\circ}$  a bekezdő nyálakhoz képest

f) nagy szögeknel is kapunk csomópontot  $\Rightarrow$  ez jó, mert több Fourier-komponensű jelet  $\Rightarrow$  pontosabban meghatározható a szerkezet (esetleg lassúvalnak  $n^{\circ}$  diffrakciók ellen)

g) a szórási hossz a rendszeren kv.-ellen látszólag névtelenül változik  $\rightarrow$  ennek előnye, hogy romszedő elemek szórási hossza is lényegesen különbözik  $\Rightarrow$  RTG diffrakciónál ezek nem adódnak lényegesen különbözõ képek, de itt igen!

pl. Fe, Mn

h) kevés elektronnal rendelkező alacsony rendszámú elemek RTG-analízise nehéz (formafaktor kicsi)

pl. H esetén  $\rightarrow$   $n^{\circ}$  diffrakció

DE a H inkohérens szórása nagy a spin miatt (ez befolyásolja a  $n^{\circ}$  diffrakciót)

magnon 0  
 $\downarrow$

$\Rightarrow$  H  $\rightarrow$  deutériumra (D) kerülne, melynek inkohérens szórása kicsi

i) a  $n^{\circ}$ -ok mindnek elektronon is, ha van spin!

pl. ferromágneses, antiferromágneses anyagoknál

=  $n^{\circ}$  diffrakciónak mágneses tulajdonságok vizsgálataiban fontos szerepe van

j) a  $n^{\circ}$  diffrakciónak hasonló eszközök hasonlóak a RTG diffrakciónak eszközök, csak sokkal nagyobbak!

## 7) Elektron diffrakció sajátosságai

a) általában elektron diffrakciónak képet TEM-lal kapunk de ezekben az elektronnyaláb energiája kicsi

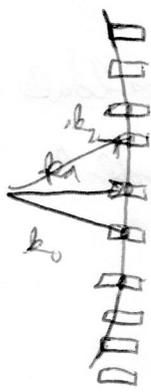
$$E = 200 - 300 \text{ keV} \Rightarrow \lambda = 2,2 \cdot 10^{-3} \text{ nm}$$

$\Rightarrow$  Mivel  $\lambda$  kicsi a  $n^{\circ}$  távolságokhoz képest  $\Rightarrow$  az Ewald-gömb sugara a reciprok rács elemi vektorához képest nagy (2 nagyságrenddel), ezért a Bragg-szög kicsi ( $2\theta < (1-2)^{\circ}$ )

$\Rightarrow$  a reciprok rács helyén az Ewald-gömb közel síkba tekinthető, ezért több reciprok rács pontja is teljesül a Bragg- feltétellel egy síkban  $\rightarrow$  mindig a reciprok rács egy síkmetszetét látjuk!  
(adott  $k$  mellett)



$\Rightarrow$  mivel a minta vékony ( $< 100 \text{ nm}$ ), ezért a diffrakciós pontok kisíródnak (nem négyzet a minta  $\Rightarrow$  négyzet ...)  
 és inkább pálcikaként képzelhetők el



} egy idő után a pálcikákról is lemegyünk  $\Rightarrow$   
 $\Rightarrow$  csökken az intenzitás a szögrel