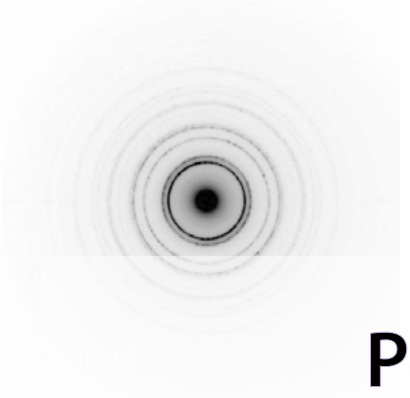
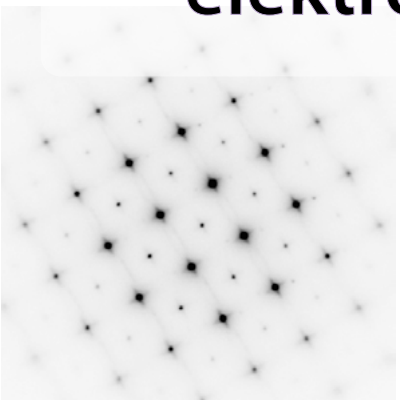
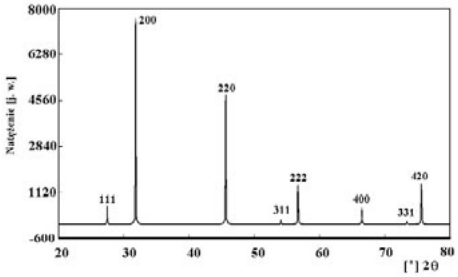
Eugeniusz Łągiewka



Podstawy dyfrakcji promieni rentgenowskich, elektronów i neutronów





WYDAWNICTWO
UNIWERSYTETU ŚLĄSKIEGO
KATOWICE 2015

Podstawy dyfrakcji promieni rentgenowskich, elektronów i neutronów

Rodzinie i Przyjaciołom

Kup książkę

PODRĘCZNIKI
I SKRYPTY

UNIWERSYTETU
ŚLĄSKIEGO
W KATOWICACH

NR 159

Kup książkę

Eugeniusz Łągiewka

Podstawy dyfrakcji promieni rentgenowskich, elektronów i neutronów

Wydawnictwo Uniwersytetu Śląskiego • Katowice 2015

Kup książkę

Redaktor serii: Nauka o Materiałach
Piotr Kwapuliński

Recenzenci
Tadeusz Bołd
Jan Dutkiewicz

Redaktor Barbara Todos-Burny
Projektant okładki Magdalena Starzyk
Redaktor techniczy Barbara Arenhövel
Łamanie Edward Wilk

Copyright © 2015 by
Wydawnictwo Uniwersytetu Śląskiego
Wszelkie prawa zastrzeżone

ISSN 1644-0552
ISBN 978-83-8012-148-5
(wersja drukowana)
ISBN 978-83-8012-149-2
(wersja elektroniczna)

Wydawca
Wydawnictwo Uniwersytetu Śląskiego
ul. Bankowa 12B, 40-007 Katowice
www.wydawnictwo.us.edu.pl
e-mail: wydawus@us.edu.pl

Wydanie I. Ark. druk. 13,25. Ark. wyd. 14,0.
Papier offset. kl. III, 90 g Cena 24 zł (+ VAT)

Druk i oprawa: „TOTEM.COM.PL Sp. z o.o." Sp.K.
ul. Jacewska 89, 88-100 Inowrocław

Kup książkę

Spis treści

Wykaz ważniejszych oznaczeń 9

1. Wstęp 13

2. Rozpraszanie promieni rentgenowskich na pojedynczym elektronie . 15

3. Rozpraszanie promieniowania rentgenowskiego na atomach . . . 21

4. Wpływ długości fali (częstotliwości) na wartość atomowego czynnika rozpraszania — anomalna dyspersja 29

5. Rozpraszanie promieniowania rentgenowskiego na zbiorach atomów budujących materiał 34
   5.1. Natężenie promieniowania rozproszonego od materiału składającego się z małych cząstek 35
   5.2. Natężenie promieniowania rozproszonego od materiału o idealnie chaotycznej konfiguracji atomów — idealny materiał amorficzny 36
   5.3. Rozpraszanie promieni rentgenowskich przez materiały składające się ze skupisk atomów o objętościach v 37
      5.3.1. Analiza członu 2. wzoru (5.8) 39
      5.3.2. Analiza członu 3. równania (5.8) 41
   5.4. Rozpraszanie promieni rentgenowskich na materiałach o periodycznej budowie atomowej — materiały krystaliczne 46
      5.4.1. Geometria dyfrakcji promieni rentgenowskich na sieci krystalicznej 47
         5.4.1.1. Równania Lauego 47
         5.4.1.2. Równanie Braggów 48
         5.4.1.3. Równanie Ewalda 50
      5.4.2. Natężenie refleksu dyfrakcyjnego od materiałów krystalicznych . 53
         5.4.2.1. Natężenie rozpraszania na komórce elementarnej sieci krystalicznej — czynnik struktury F 54
         5.4.2.2. Rozpraszanie i dyfrakcja na sieci krystalicznej 55
      5.4.3. Integralne (całkowe) pojęcie natężenia refleksu dyfrakcyjnego . . 62

Kup książkę

6. Czynnik absorpcji w natężeniu refleksu dyfrakcyjnego 65

7. Czynnik temperaturowy w natężeniu wiązki dyfrakcyjnej 69

8. Czynnik krotności płaszczyzn krystalicznych w natężeniu refleksu dyfrakcyjnego 72

9. Natężenie refleksów dyfrakcyjnych od materiałów krystalicznych wykazujących uprzywilejowaną orientację krystalograficzną (teksturę) . 75

10. Natężenie rentgenowskiego promieniowania dyfrakcyjnego od materiałów krystalicznych typu roztworów stałych 77
10.1. Natężenie promieniowania rozproszonego w przypadku tworzenia się uporządkowania bliskiego zasięgu 79
10.2. Natężenie promieniowania w przypadku rozpadu przesyconego nieuporządkowanego roztworu stałego 84
10.3. Obraz dyfrakcyjny w przypadku występowania uporządkowania dalekiego zasięgu 85

11. Rozpraszanie promieniowania rentgenowskiego na „supersieciach” . 92

12. Obrazy dyfrakcyjne od materiałów wykazujących błędy ułożenia . . 96

13. Podstawy dynamicznej teorii rozpraszania promieni rentgenowskich . 100
13.1. Rozpraszanie promieniowania rentgenowskiego na jednej płaszczyźnie sieci krystalicznej 101
13.2. Natężenie refleksu dyfrakcyjnego w dynamicznej teorii Darwina . . 105
13.3. Zjawisko ekstynkcji, poprawki ekstynkcyjne 110

14. Rozpraszanie wiązki elektronowej na atomie 114

15. Geometria i natężenie wiązek dyfrakcyjnych elektronów rozproszonych na sieci krystalicznej 122

16. Natężenie obrazów dyfrakcyjnych elektronów od materiałów krystalicznych — przybliżenie kinematyczne 133
16.1. Rozpraszanie wiązki elektronowej na komórce elementarnej sieci krystalicznej 133
16.2. Rozpraszanie wiązki elektronowej na układzie komórek tworzących kryształ (krystalit) — przybliżenie kinematyczne 134

17. Wpływ niedoskonałości struktury krystalicznej na natężenie refleksów dyfrakcyjnych 140
17.1. Kontrast na dyslokacjach 141
17.2. Kontrast na błędach ułożenia i bliźniakach 142
17.3. Kontrast Moire’a 145
17.4. Kontrast dyfrakcyjny na wydzieleniach 147
17.5. Kontrast dyfrakcyjny na nierównościach grubości próbki 149

Kup książkę

18. Dynamiczna teoria dyfrakcji elektronów 151
19. Podstawy wysokorozdzielczej mikroskopii elektronowej 158
20. Dyfrakcja powolnych elektronów (LEED) 166
21. Dyfrakcja elektronów rozproszonych niesprężyście (niekoherentnie) . 174
22. Dyfrakcja neutronów 182
Literatura 191
Aneksy 195

Kup książkę

Wykaz ważniejszych oznaczeń

e	— ładunek elektronu
Z	— liczba porządkowa pierwiastka
V	— potencjał elektryczny
m	— masa
i	— natężenie prądu
t	— czas
T	— temperatura
d_m, d_x	— gęstość metalu
E	— amplituda fali (amplituda wektora pola elektrycznego fali elektromagnetycznej)
f	— atomowy czynnik rozpraszania
F_{hkl}	— czynnik struktury
RDF	— funkcja radialnego rozmieszczenia atomów (***R**adial **D**istribution **F**unction*)
ρ	— właściwy opór elektryczny
a_0, b_0, c_0	— stałe sieciowe
λ	— długość fali
(hkl)	— wskaźniki płaszczyzn krystalicznych Mülera
$\{hkl\}$	— rodzina płaszczyzn
hkl	— wskaźniki refleksu dyfrakcyjnego
d_{hkl}	— odległość miedzypłaszczyznowa
Θ	— kąt Bragga
2Θ	— kąt rozproszenia (kąt między wiązką padającą a dyfrakcyjną)
$\boldsymbol{r}^*_{hkl}$	— wektor sieci odwrotnej
r^*_{hkl}	— moduł wektora sieci odwrotnej
$\boldsymbol{a}^*_0$, $\boldsymbol{b}^*_0$, $\boldsymbol{c}^*_0$	— wektory jednostkowe sieci odwrotnej
$\boldsymbol{k}$	— wektor falowy dyfrakcji (wektor dyfrakcji)
$\boldsymbol{k}_0$	— wektor falowy wiązki pierwotnej
$\boldsymbol{k}_1$	— wektor falowy wiązki dyfrakcyjnej

Kup książkę

k	— moduł wektora falowego
$\boldsymbol{S}, \boldsymbol{S}_1$	— wektory jednostkowe kierunku wiązki pierwotnej i dyfrakcyjnej
J	— natężenie promieniowania rozproszonego
J_0	— natężenie wiązki pierwotnej
$J_{dyf.}$	— natężenie rozpraszania dyfuzyjnego promieni rentgenowskich
J_{hkl}	— natężenie refleksu dyfrakcyjnego
N	— liczba komórek elementarnych w krystalicie
n	— liczba atomów w komórce elementarnej
x, y, z	— współrzędne atomów w komórce elementarnej
V_k	— objętość komórki elementarnej
V_A	— objętość fazy A
B, β_k, β_z	— szerokość refleksu dyfrakcyjnego odpowiednio: całkowita, związana z wielkością krystalitów i ze zniekształceniami sieciowymi II rodzaju
b	— poszerzenie aparaturowe refleksu
D	— wielkość krystalitu
$\left\langle \frac{\Delta d}{d} \right\rangle$	— zniekształcenia I rodzaju
$\left\langle \frac{\Delta a}{a} \right\rangle$	— zniekształcenia II rodzaju
U^2	— zniekształcenia III rodzaju
ρ_r	— gęstość atomowa w odległości r (funkcja RDF)
ρ_0	— średnia gęstość atomowa
R_G	— promień Guinera
$\underline{\Theta}$	— temperatura charakterystyczna pierwiastka
T	— temperatura w skali Kelwina
$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)$	— masowy współczynnik absorpcji
d, x	— grubość warstwy
$\boldsymbol{b}$	— wektor Burgersa
E_k	— energia kinetyczna elektronu
E_w	— energia wiązania
ρ_d	— gęstość dyslokacji
φ	— kąt między płaszczyznami krystalicznymi
[*uvw*], <*uvw*>	— tekstura osiowa (włóknista)
(*hkl*)[*uvw*], {*hkl*}<*uvw*>	— tekstura pełna (walcowania, blach)
FIM	— jonowa mikroskopia polowa (***F**ield **I**on **M**icroscopy*)
EM	— mikroskopia elektronowa (***E**lectron **M**icroscopy*)

Kup książkę

TEM	— transmisyjna mikroskopia elektronowa (***T**ransmission **E**lectron **M**icroscopy*)
ESM	— skaningowa mikroskopia elektronowa (***E**lectron **S**canning **M**icroscopy*)
SAD	— dyfrakcja z wybranego obszaru (***S**elected **A**rea **D**iffraction*)
CBED	— dyfrakcja w zbieżnej wiązce (***C**onvergent **B**eam **E**lectron **D**iffraction*)
HREM	— wysokorozdzielcza mikroskopia elektronowa (***H**igh **R**esolution **E**lectron **M**icroscopy*)
RHEED	— odbiciowa wysokoenergetyczna dyfrakcja elektronowa (***R**eflection **H**igh **E**nergy **E**lectron **D**iffraction*)
GIXA	— dyfrakcja pod stałym kątem padania — SKP (***G**lancing **I**ncidence **X**-ray **A**nalysis*)
SAXS	— małokątowe rozpraszanie promieni rentgenowskich (***S**mall **A**ngle X-ray **S**cattering*)
XRD	— dyfrakcja promieni rentgenowskich (***X**-**R**ay **D**iffraction*)
LEED	— dyfrakcja elektronów o niskiej energii / dyfrakcja powolnych elektronów (***L**ow **E**nergy **E**lectron **D**iffraction*)
ND	— neutronografia (***N**eutron **D**iffraction*)
EBSD	— dyfrakcja elektronów wstecznie rozproszonych (***E**lectron **B**ack **S**cattered **D**iffraction*)
TKL	— transmisyjna dyfrakcja linii Kikuchi (***T**ransmission **K**ikuchi **D**iffraction*)
ZOLZ	— zerowa strefa Lauego (***Z**ero **O**rder **L**aue **Z**one*)
FOLZ	— pierwsza strefa Lauego (***F**irst **O**rder **L**aue **Z**one*)
HOLZ	— strefa Lauego wyższego rzędu (***H**igher **O**rder **L**aue **Z**one*)

Kup książkę

1. Wstęp

Rozpraszanie oraz dyfrakcja promieni rentgenowskich i elektronów są obecnie podstawowymi metodami badań struktury materiałów. Rozwój konstrukcji nowoczesnych dyfraktometrów i mikroskopów elektronowych przyczynił się do powstania nowych technik tworzenia i rejestracji obrazów dyfrakcyjnych (np.: metoda stałego kąta padania, dyfrakcja z mikroobszarów, wysokorozdzielcza mikroskopia elektronowa czy refraktometria). Rozwijające się równolegle komputerowe systemy sterowania pracą urządzeń zwiększyły precyzję zapisu danych eksperymentalnych, co w połączeniu z powstaniem i doskonaleniem programów obliczeniowych umożliwiło stworzenie nowych metod badań struktury materiałów oraz „renesans" dotychczasowych metod analizy, które ze względu na czasochłonny aparat obliczeniowy dotąd nie mogły być powszechnie stosowane. Przykładem mogą tu być: konstrukcja przystawek do reflektometrii, techniki pomiaru przy stałym kącie padania wiązki, programy komputerowe z zakresu krystalografii elektronowej, analizy Rietvielda, analizy rozpraszania dyfuzyjnego i niskokątowego, określanie struktury komórki elementarnej, radialnej funkcji gęstości atomowej i inne.

Obecne programy komputerowe dostarczane wraz z aparaturą pozwalają niemal automatycznie przetwarzać otrzymane obrazy eksperymentalne pod względem wyznaczania niektórych parametrów struktury materiałów. Programy te stanowią ogromną pomoc, jednak tylko dla doświadczonej kadry badawczej, która interpretując otrzymane wyniki uwzględnia możliwe błędy, popełniane czy to w pracy urządzenia, czy algorytmu programu komputerowego. Wieloletnie doświadczenia dydaktyczne autora wykazały, że zajęcia prowadzone ze studentami i doktorantami w zakresie metod badań struktury materiałów z zastosowaniem profesjonalnych programów komputerowych opierają się niemal na mechanicznej analizie, bez uwzględnienia możliwych błędów programu i wiadomości o materiałach. Dzieje się tak zapewne z tego względu, że student nie zawsze rozumie podstawy fizyczne zmiany charakteru obrazu dyfrakcyjnego i możliwości błędów wynikających z pracy aparatury i stosowanych programów. Taki „komputerowy" sposób szkolenia młodej kadry naukowej i studentów utrudnia

Kup książkę

doskonalenie zarówno metodyki badawczej, jak i aparatury oraz tworzenie nowego oprogramowania.

Biorąc to pod uwagę, wobec braku odpowiedniego podręcznika w języku polskim, autor postanowił opisać podstawy fizyczne i krystalograficzne matematycznych związków między stopniem uporządkowania struktury materiału a charakterem jego obrazu dyfrakcyjnego otrzymanego za pomocą wiązki promieniowania rentgenowskiego, wiązki elektronowej lub neutronowej. Niniejszy podręcznik powinien wypełnić istniejącą lukę w piśmiennictwie krajowym. Wspólnie z kilkoma wcześniejszymi wydaniami podręcznika *Rentgenowska analiza strukturalna* autorstwa Z. Bojarskiego i E. Łągiewki oraz monografią *Struktura, właściwości i metody badań materiałów otrzymanych elektrolitycznie* E. Łągiewki i A. Budnioka będzie stanowił pomoc dydaktyczną dla studentów i doktorantów kierunków: inżynieria materiałowa, fizyka ciała stałego, metalurgia, chemia i kierunków pokrewnych. Podręcznik ten może być także przydatny dla pracowników instytutów badawczych i kadry inżynierskiej ośrodków przemysłowych, którzy w swojej pracy zawodowej spotykają się z problemami podnoszenia jakości wytwarzanych materiałów i produktów.

Kup książkę

Eugeniusz Łągiewka

Podstawy dyfrakcji promieni rentgenowskich...

Więcej o książce

CENA 24 ZŁ
(+ VAT)

ISSN 1644-0552
ISBN 978-83-8012-149-2

Kup książkę