Oblicz a i c z dwóch reflexów
(dyfraktogram substancji z układu tetragonalnego)

```
(%i4) Lambda: 1.5418;
(%o4) 1.5418
```

```
(%i14) n1: 1$ h1: 3$ k1: 1$ l1: 1$ DwaTheta1: 29.982$
       n2: 1$ h2: 3$ k2: 1$ l2: 2$ DwaTheta2: 35.987$
```

1. Obliczam d

```
(%i15) d1: n1*Lambda/(2*sin(2*%pi*(DwaTheta1/2)/360));
(%o15) 2.9803
```

```
(%i16) d2: n2*Lambda/(2*sin(2*%pi*(DwaTheta2/2)/360));
(%o16) 2.4956
```

2. Rozwiązuję układ równań

```
(%i17) Rownanie1: 1/d1^2 = (h1^2 + k1^2)/a0^2 + l1^2/c0^2;
```

(%o17) $0.11259 = \frac{1}{c0^2} + \frac{10}{a0^2}$

```
(%i18) Rownanie2: 1/d2^2 = (h2^2 + k2^2)/a0^2 + l2^2/c0^2;
```

(%o18) $0.16057 = \frac{4}{c0^2} + \frac{10}{a0^2}$

```
(%i19) ListaZmiennych1: [a0,c0];
(%o19) [a0,c0]
```

```
(%i20) Wynik1: solve([Rownanie1,Rownanie2],ListaZmiennych1);
(%o20) [[a0=-10.175,c0=-7.907],
        [a0=-10.175,c0= 7.907],
        [a0= 10.175,c0=-7.907],
        [a0= 10.175,c0= 7.907],
        [a0=   0   ,c0= 0    ]]
```

*<u>Zadanie.</u> Oblicz pozycję na dyfraktogramie*

## Zad. 5.

Podaj pozycję (2Θ) na dyfraktogramie proszkowym refleksu rzędu n pochodzącego od rodziny płaszczyzn $\mathbf{m_{(hkl)}}$. Kryształ opisano grupą P4. Parametry sieciowe wynoszą $a_0$ i $c_0$.Użyto promieniowania o długości fali λ. A ile wynosiła by pozycja podana jako kąt odbłysku?

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Dane | $a_0$ | 9.4182 | 9.4182 | 9.4182 | 9.4182 | 9.4182 | 9.4182 | 9.4182 |
| | $c_0$ | 11.432 | 17.789 | 12.439 | 15.875 | 15.897 | 19.543 | 11.000 |
| | λ [A] | 1.5418 | 1.5418 | 1.5418 | 1.5418 | 1.7902 | 1.7902 | 1.7902 |
| | *n* | *2* | *2* | *2* | *2* | *2* | *2* | *2* |
| | h | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 2 | 1 |
| | k | 1 | 2 | 2 | 1 | 2 | 2 | 3 |
| | l | 1 | 2 | 1 | 2 | 3 | 3 | 1 |
| Kroki: | | | | | | | | |
| $1/d^2=(h^2+k^2)/a^2+l^2/c^2$ | d = | 3.9522 | 3.8067 | 3.9894 | 5.1018 | 3.2972 | 2.9649 | 2.8748 |
| $2\Theta=2\arcsin(n\lambda/2d)$ | 2Θ = | 45.923 | 47.785 | 45.470 | 35.180 | 65.768 | 74.283 | 77.031 |
| $\Theta=2\Theta/2$ | Θ = | 22.961 | 23.893 | 22.735 | 17.590 | 32.884 | 37.142 | 38.515 |

# Wpływ komórki F na wygaszenia systematyczne

(F)

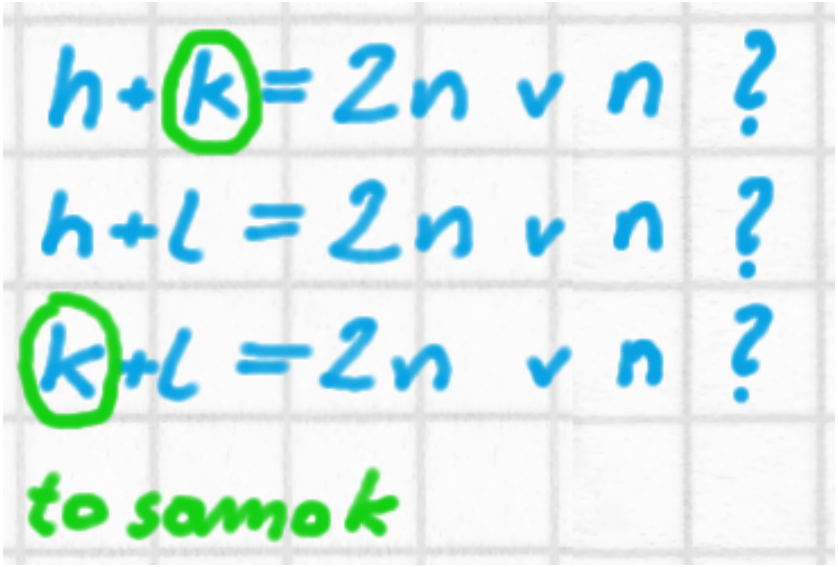
$$F_{hkl} = f \cdot \cos\left(2\pi\left(h\cdot 0 + k\cdot 0 + l\cdot 0\right)\right) +$$
$$+ f \cdot \cos\left(2\pi\left(h\cdot\tfrac{1}{2} + k\cdot\tfrac{1}{2} + l\cdot 0\right)\right) +$$
$$+ f \cdot \cos\left(2\pi\left(h\cdot\tfrac{1}{2} + k\cdot 0 + l\cdot\tfrac{1}{2}\right)\right) +$$
$$+ f \cdot \cos\left(2\pi\left(h\cdot 0 + k\cdot\tfrac{1}{2} + l\cdot\tfrac{1}{2}\right)\right) =$$

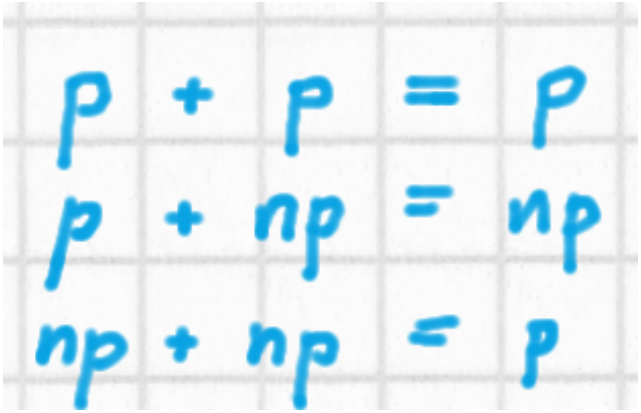
$$= f\cdot\cos 0 + f\cdot\cos\left(\pi\cdot(h+k)\right) +$$
$$+ f\cdot\cos\left(\pi\cdot(h+l)\right) + f\cdot\cos\left(\pi\cdot(k+l)\right) =$$

$$= f \pm f \pm f \pm f$$

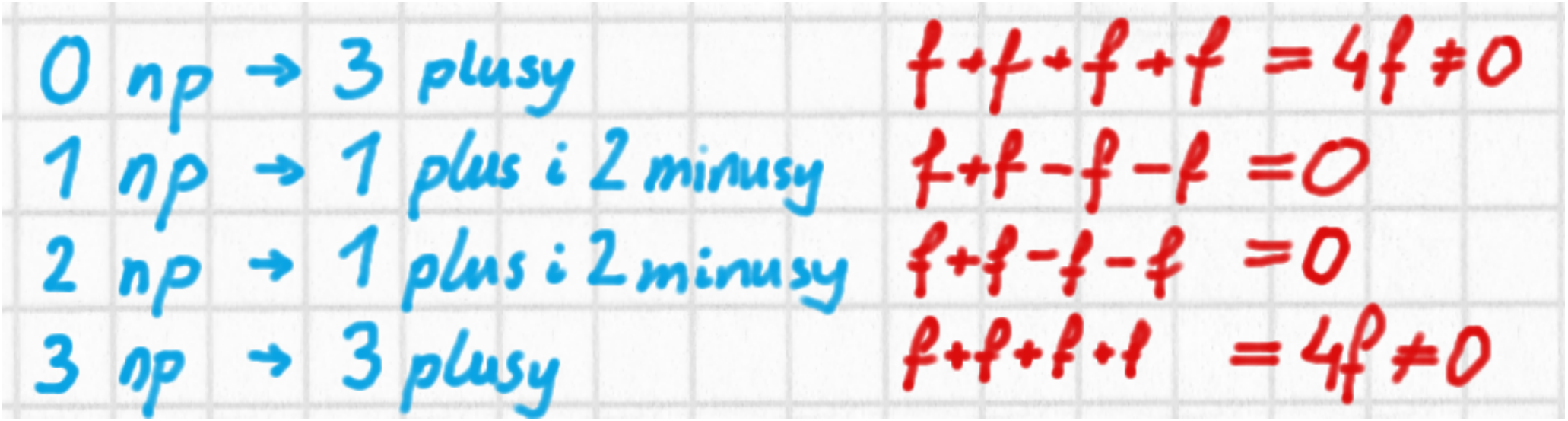
# Wpływ komórki F na wygaszenia systematyczne – analiza rozwiązania

– nie każda kombinacja f ± f ± f ± f jest możliwa bo h, k i l mają tylko 4 kombinacje p/np




– 4 kombinacje p/np




czyli refleks jest gdy wszystkie h, k i l są p lub wszystkie np

# Przykładowy refleks kryształu opisanego grupą z komórką F

$$F_{112} = f\cdot\cos\left(2\pi\left(1\cdot 0+1\cdot 0+2\cdot 0\right)\right)+$$
$$f\cdot\cos\left(2\pi\left(1\cdot\tfrac{1}{2}+1\cdot\tfrac{1}{2}+2\cdot 0\right)\right)+$$
$$f\cdot\cos\left(2\pi\left(1\cdot\tfrac{1}{2}+1\cdot 0+2\cdot\tfrac{1}{2}\right)\right)+$$
$$f\cdot\cos\left(2\pi\left(1\cdot 0+1\cdot\tfrac{1}{2}+2\cdot\tfrac{1}{2}\right)\right)=$$

$$= f\cdot\cos 0 + f\cdot\cos 2\pi +$$
$$+ f\cdot\cos 3\pi + f\cdot\cos 3\pi$$

$$= 1+1-1-1=0$$

$\Rightarrow$ nie będzie refleksu 112