

# EGYKRISTÁLY RÖNTGEN DIFFRAKCIÓ

*Balogh Levente, Gubicza Jenő és Zsoldos Lehel*

## 1. BEVEZETŐ

A röntgen diffrakció a mai tudomány egyik meghatározó, nagyon változatos vizsgálati módszere, amit a természettudományok valamennyi ágában használnak. Különböző röntgen diffrakciós módszerek léteznek kristályos és amorf anyagok, folyadékok és gázok vizsgálatára. A kristályos anyagok esetében alkalmazott röntgen diffrakciós eljárásokat két nagy csoportra bonthatjuk, a polikristály vagy pordiffrakciós és egykristály diffrakciós módszerekre. E két csoport az alkalmazott eszközökben és a vizsgálat céljában is jelentősen eltér egymástól.

*Polikristályos vagy pordiffrakcióról* akkor beszélünk, ha a röntgennyalábbal megvilágított anyag nagyszámú krisztallitot tartalmaz, amelyek térbeli orientációja egymástól különböző, gyakran véletlenszerű. Ennek eredményeképpen, monokromatikus sugárzást használva tetszőleges minta-orientáció esetén is elég sok kristályszemcse kerül diffrakciós helyzetbe ahhoz, hogy a kristályszerkezetnek megfelelő összes lehetséges diffrakciós maximum (reflexió) mérhető legyen. A pordiffrakciós módszerek hatékonyan használhatók a következő esetekben:

- (i) *Fázisanalízis*, amikor egy polikristályos vagy por mintában lévő egy vagy több kristályos fázist beazonosítjuk.
- (ii) *Pontos rácsparaméter meghatározás*, amikor egy ismert kristályszerkezetű anyag rácsparaméterét akarjuk nagyon pontosan megmérni.
- (iii) *Mikroszerkezet vizsgálat*, amikor a diffrakciós vonalak alakjából (vonalprofil analízis) a polikristályos minta krisztallitméret eloszlását és a mintában lévő kristályhibák típusát és mennyiségét határozzuk meg.

A pordiffrakciós módszerek bizonyos esetekben ismeretlen kristályszerkezetű anyagok szerkezetmeghatározásában is használhatók (Rietveld módszerek), azonban nem olyan hatékonyan, mint az egykristály diffrakciós módszerek.

*Az egykristály diffrakciós módszerek* egykristályok vizsgálatára alkalmasak. Egykristály minták esetében az atomok hosszútávú kristályos rendje nem bomlik meg az anyag teljes térfogatában. Ugyanakkor egykristály diffrakcióról beszélhetünk akkor is, ha a nyaláb mérete kisebb, mint a krisztallitméret, így egyszerre csak egy krisztallit van megvilágítva (egykristály mikrodiffrakció).

Az egykristály diffrakciós módszerek hatékonyan használhatók a következő esetekben:

(i) *Szerkezetmeghatározás*, amikor egy ismeretlen szerkezetű egykristály atomjainak elrendezését kell meghatározni. Manapság ezt a módszert intenzíven használják fehérjék szerkezetének meghatározásában is. Az ismeretlen szerkezetű fehérjéből készült egykristály atomi szerkezetét röntgendiffrakcióval nagyon pontosan meg lehet határozni, amiből már a fehérjemolekula szerkezete is adódik.

(ii) *Egykristály rácshiba-szerkezetének meghatározása*: az egykristályok is tartalmazhatnak rácshibákat, amik az előállítás során vagy utólagos deformáció hatására kerülnek az anyagba. Az egykristályban lévő diszlokációk mennyiségét és típusát az egyes diffrakciós csúcsok alakjának analizálásával határozhatjuk meg, ha a diszlokáció sűrűség jóval nagyobb, mint  $10^{12} \text{ m}^{-2}$ . Kis hibasűrűség esetén képző, többnyire elektronmikroszkópos módszerek alkalmazhatók.

(iii) *Egykristályok orientációjának meghatározása*, amikor egy egykristály kristálytani tengelyeinek orientációját szeretnénk megismerni a mintatartóhoz rögzített koordináta-rendszerben. Erre akkor van szükség, amikor az egykristályt meg kell munkálni, például egy adott kristálysíkkal párhuzamosan kell elvágni. Az (ii) alpontban említett vizsgálat elvégzésének előkészítéséhez is szükség van a kristály orientációjának ismeretére. A következőkben az egykristály diffrakciós eljárások közül csak a kristály orientációjának meghatározására szolgáló Laue-módszerrel foglalkozunk.

## 2. A LAUE-MÓDSZER ELMÉLETI LEÍRÁSA

A Laue-módszer a röntgen diffrakciós módszerek legrégebbi képviselője, az egykristályok vizsgálatának legismertebb és legegyszerűbb eljárása, amelyet általánosan használnak a kristályok orientációjának meghatározására. A módszer a kristály orientációját, még egyszerű mérőeszközök alkalmazásával is, egy fok körüli pontossággal megadja. A Laue-felvétel elkészítéséhez a mintát keskeny, néhány tized mm átmérőjű, *folytonos spektrumú* röntgen nyálákkal világítjuk meg, és általában sík, vagy esetleg hengeres detektáló felülettel (film, helyzetérzékeny számláló, „image plate”<sup>1</sup>) rögzítjük az elhajlási képet. Ez a detektáló felület többnyire sík és a primer sugárra merőleges. Ha ez a felület a  $2\theta < 90^\circ$  tartományban helyezkedik el, akkor *első reflexiós geometriáról* beszélünk (1. ábra), ha pedig a  $2\theta > 90^\circ$  tartományban, akkor *hátsó reflexiósról*. A folytonos spektrum miatt minden nem túl kis rácssík távolsággal rendelkező síksereg talál olyan hullámhosszú összetevőt, amelyre, adott helyzetében a Bragg-feltételt teljesíti.

<sup>1</sup> Az image plate hajlékony hordozóra felvitt BaFBr(Eu<sup>2+</sup>) réteg. A sugárzás az Eu<sup>2+</sup>-t ionizálja, a keltett elektronok pedig befogódnak a réteg színcentrumain. Kiolvasáskor lézerrel letapogatva a réteg látható fényt emittál.

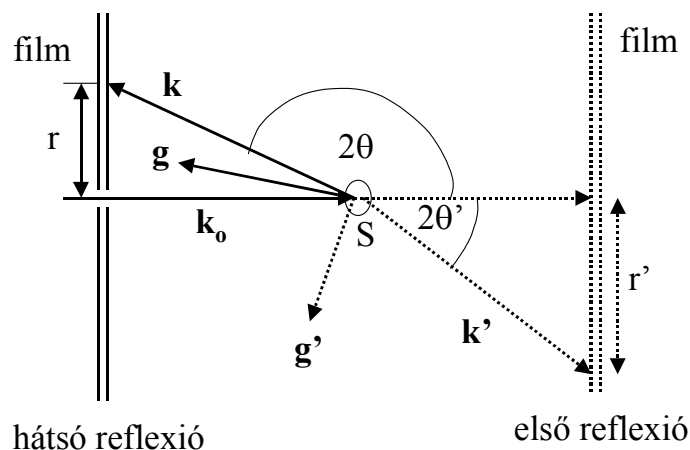
Adott minta orientációnál minden  $hkl$  Miller indexű síksereg esetében a  $d_{hkl}$  síktávolság és a  $\theta_{hkl}$  Bragg szög rögzített (mert a beeső röntgen nyaláb és a  $hkl$  síksereg szögét a mérési elrendezés meghatározza), így akkor jön létre reflexió, ha a folytonos spektrumú röntgensugárzás tartalmazza azt a  $\lambda$  hullámhosszt, ami teljesíti a Bragg-törvényt [1]:

$$2d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = \lambda. \quad (1)$$

A különböző síkokról reflektált nyalábok ezért különböző hullámhosszúak. A reflektált nyalábok nyomának helyéből, a primer nyaláb irányának ismeretében meghatározható a reflektáló síksereg normálisának iránya (ez éppen  $\mathbf{g}$  diffrakciós vektor iránya), ahogy az 1. ábrán is látható. A  $\mathbf{g}$  diffrakciós vektor, és a primer és a szórt nyalábok  $\mathbf{k}_0$  illetve  $\mathbf{k}$  hullámszámvektorai között fennáll a következő kapcsolat, amely a Bragg-törvénnyel ekvivalens:

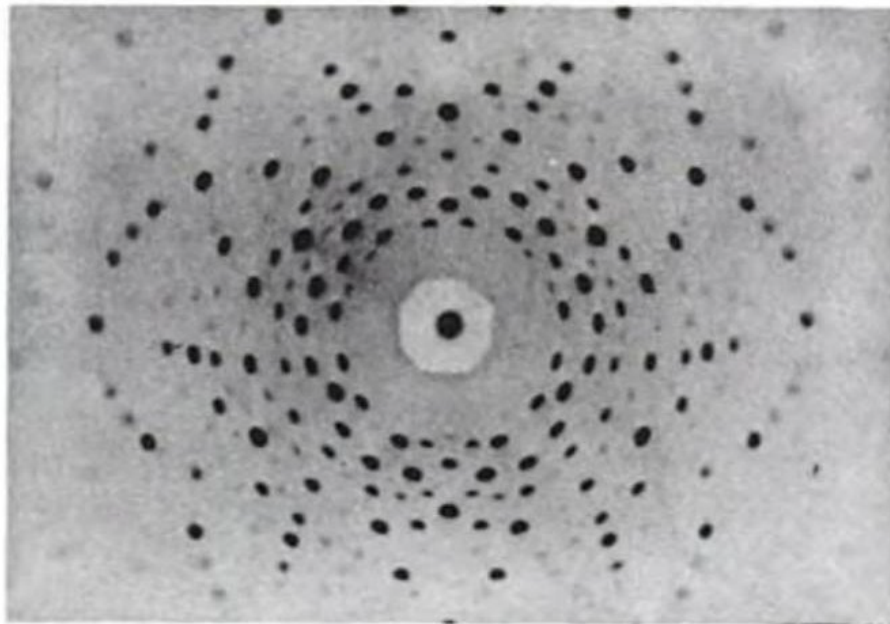
$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{g}, \quad (2)$$

ezért egy adott síkhoz tartozó  $\mathbf{g}$  vektor a primer és a síkról szórt nyalábok  $\mathbf{k}_0$  illetve  $\mathbf{k}$  hullámszámvektorai által kifeszített síkban helyezkedik el úgy, hogy az a belépő sugárzással szembe mutató  $-\mathbf{k}_0$  és a reflexió felé mutató  $\mathbf{k}$  vektorok szögfelezőjének irányában áll (1. ábra). A különböző diffrakciós foltok egymáshoz viszonyított helyzetéből meghatározhatók a hozzájuk tartozó síkok normálisai által bezárt szögek, amelyeket összehasonlítva az adott kristályrendszerhez és szimmetriákhoz tartozó lehetséges szögértékekkel meghatározható a kristály orientációja is.



1. ábra. A Laue-felvétel geometriája.  $S$  - a mintát jelöli (a nyilak csak a vektorok irányát jelölik).

A Laue-felvételek jellemző tulajdonsága, hogy ha a mintát valamely szimmetria tengelye (síkja) mentén világítjuk meg és a detektáló felület erre merőleges, akkor az elhajlási kép is mutatja ezt a szimmetriát, ahogy a 2. ábrán is látható.



2. ábra: Kvarc egykristály első reflexiók Laue felvétele. A röntgennyaláb párhuzamos a hexagonális kristály  $c$  tengelyével, emiatt az elhajlási kép 3 fogású szimmetriával rendelkezik.

A szimmetria tengelyek iránya szerencsés esetben így további vizsgálat és a kristályt leíró adatok (pl. rácsparaméter) ismerete nélkül is felismerhető. Néha ezért több felvételt készítenek, a minta különböző helyzeteiben.

Azok a hálózati síkok, amelyek párhuzamosak egy közös iránnyal egy *zónát* alkotnak, a közös irány pedig a *zónatengely* (lásd 3.a ábra). A zónatengely irányvektorát,  $\mathbf{A}_{uvw}$  fejezzük ki az elemi rácsvektorok lineáris kombinációjaként:

$$\mathbf{A}_{uvw} = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + w\mathbf{a}_3, \quad (3)$$

ahol  $u$ ,  $v$  és  $w$  egész számok. Egy  $hkl$  sík akkor párhuzamos az  $\mathbf{A}_{uvw}$  irányvektorú zónatengellyel, ha a sík normálvektorának,  $\mathbf{H}_{hkl}$ , és a zónatengely irányvektorának skalárszorzata 0:

$$\mathbf{H}_{hkl} \cdot \mathbf{A}_{uvw} = 0. \quad (4)$$

A diffrakció elméletéből tudjuk, hogy a  $hkl$  sík diffrakciós vektora,  $\mathbf{g}_{hkl}$ , párhuzamos a reflektáló sík normálvektorával. Ebből következik, hogy az egy zónához tartozó reflexiókra:

$$\mathbf{g}_{hkl} \cdot \mathbf{A}_{uvw} = 0, \quad (5)$$

ahol

$$\mathbf{g}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3 \quad (6)$$

és  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  a reciprokrács bázisvektorai. Mivel a kristály és a reciprokrács bázisvektorai definíció szerint teljesítik a  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$  összefüggést, ezért (3) és (6) egyenletek (5)-be helyettesítésével kapjuk az ún. *zónatörvényt*:

$$hu + kv + lw = 0. \quad (7)$$

Jelöljük egy adott  $hkl$  síkra beeső illetve arról reflektálódott nyaláb irányú egységvektorokat  $\mathbf{s}_0$ -lal illetve  $\mathbf{s}$ -sel, amelyek a  $\mathbf{k}$  és  $\mathbf{k}_0$  vektorok  $\lambda$ -szorosai. A diffrakció elmélete alapján tudjuk, hogy egy  $hkl$  síksereg akkor kerül diffrakciós helyzetbe, ha teljesül a következő egyenlőség:

$$\mathbf{s} - \mathbf{s}_0 = \lambda \mathbf{g}_{hkl}. \quad (8)$$

Szorozzuk meg az előbbi egyenletet mindkét oldalát a zónatengely irányvektorával:

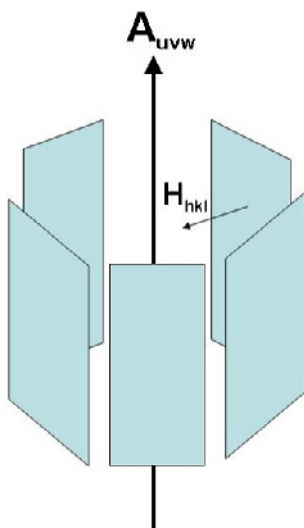
$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{A}_{uvw} - \mathbf{s}_0 \cdot \mathbf{A}_{uvw} = \lambda \mathbf{g}_{hkl} \cdot \mathbf{A}_{uvw}. \quad (9)$$

Ha olyan  $hkl$  síkseregeket tekintünk, amik az  $uvw$  zónához tartoznak, akkor  $\mathbf{g}_{hkl} \cdot \mathbf{A}_{uvw} = 0$ , így a következő összefüggés adódik:

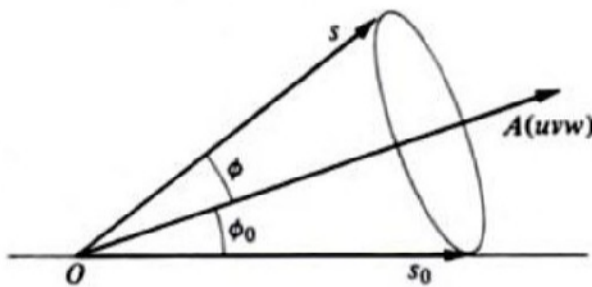
$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{A}_{uvw} = \mathbf{s}_0 \cdot \mathbf{A}_{uvw}. \quad (10)$$

A fenti egyenlet azt jelenti, hogy a beeső nyaláb iránya,  $\mathbf{s}_0$ , és a zónatengely,  $\mathbf{A}_{uvw}$ , közötti  $\phi_0$  szög megegyezik a reflektált nyaláb iránya,  $\mathbf{s}$ , és a zónatengely,  $\mathbf{A}_{uvw}$ , közötti szöggel az összes olyan  $hkl$  síksereg esetében, ami az  $uvw$  zónához tartozik.

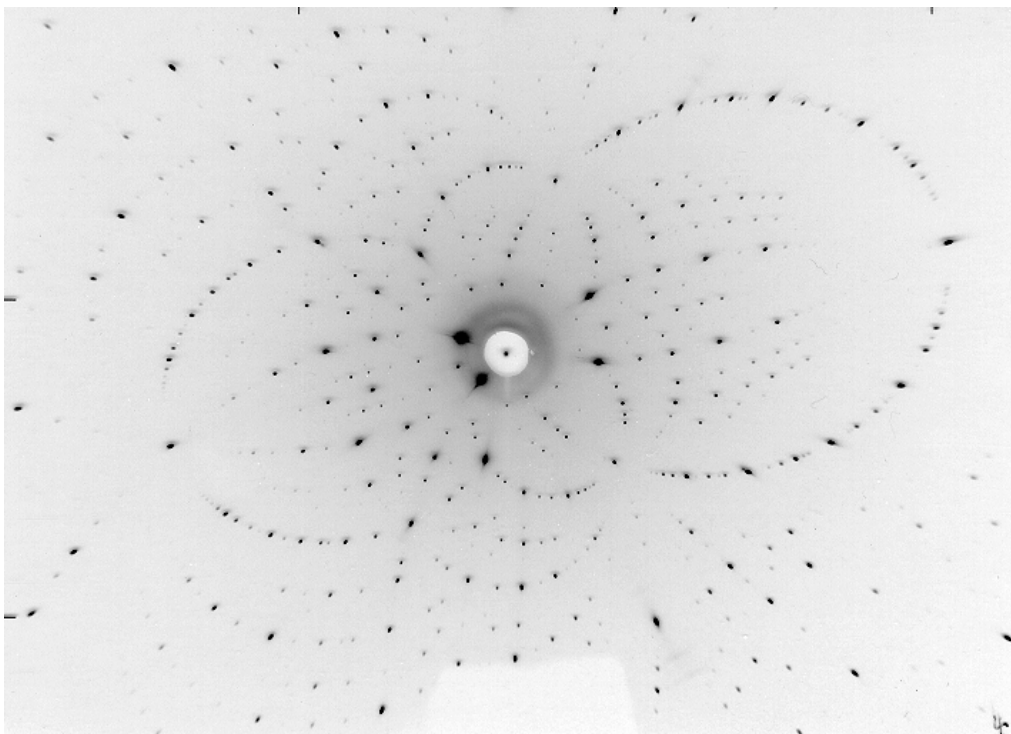
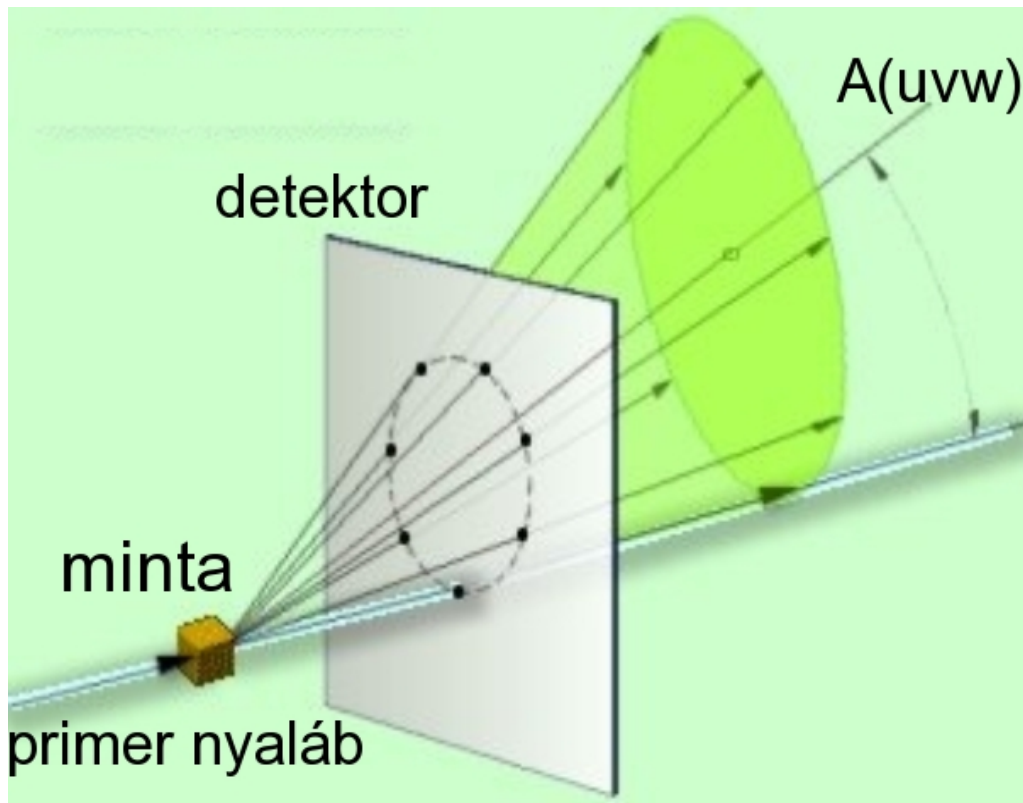
A (10) összefüggés alapján tehát a közös zónatengelyhez tartozó síkokról reflektált sugárzás irányát megadó  $\mathbf{s}$  vektorok egy  $\phi_0$  félnyílásszögű kúpfelületre illeszkednek, ahogy a 3.b ábra is mutatja. Az ezekről a síkokról kapott intenzitás maximumok a film síkja és az említett kúpfelület metszeteként előálló kúpszeleten helyezkednek el. Ez a kúpszelet első reflexiós helyzetben ellipszis, míg hátsó reflexiós helyzetben hiperbola, ahogy a 4.a és b ábrákon is látszik. Egy Laue-felvételen több kúpszelet is megfigyelhető, amelyek mindegyike egy-egy zónatengelynek felel meg. A kúpszeleteken elhelyezkedő minden egyes Laue-folt egy-egy síkseregnek felel meg. Ha a diffrakciós foltokat sikerült indexelni, akkor a kristály orientációja megadható. Az eredmény további felhasználása szempontjából fontos, hogy a mintán vagy tartóján legyenek jól azonosítható vonatkoztatási irányok.



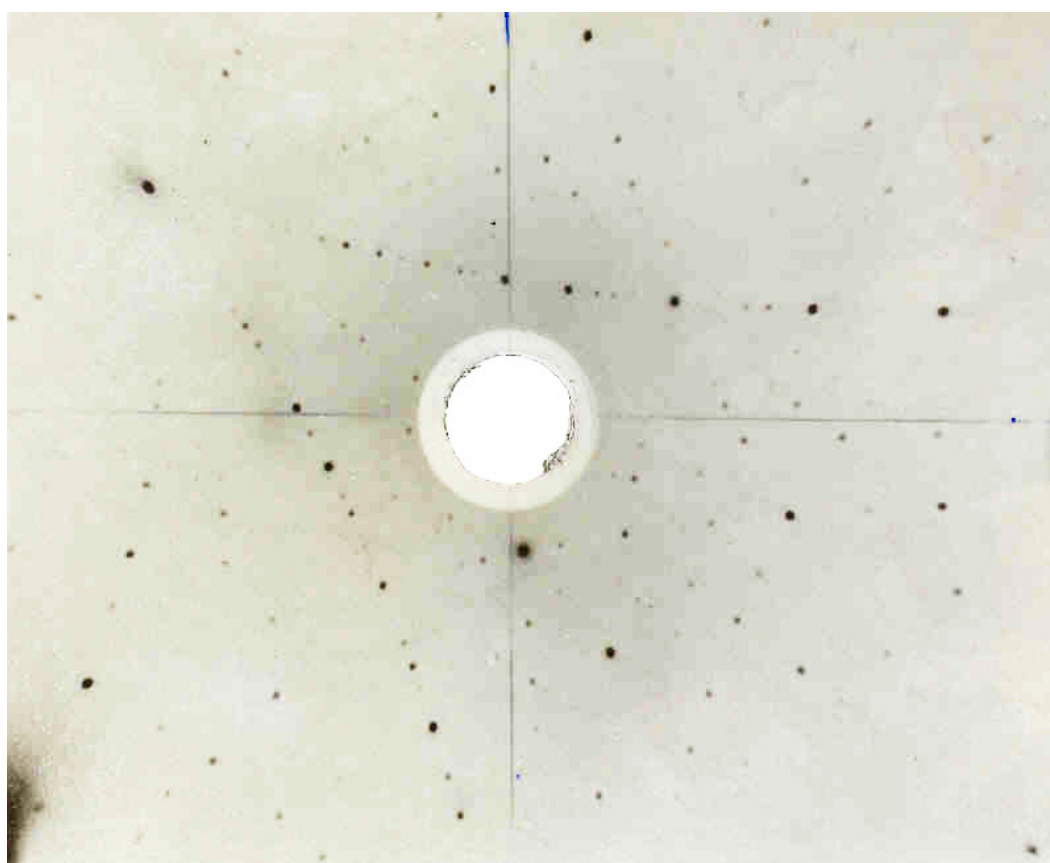
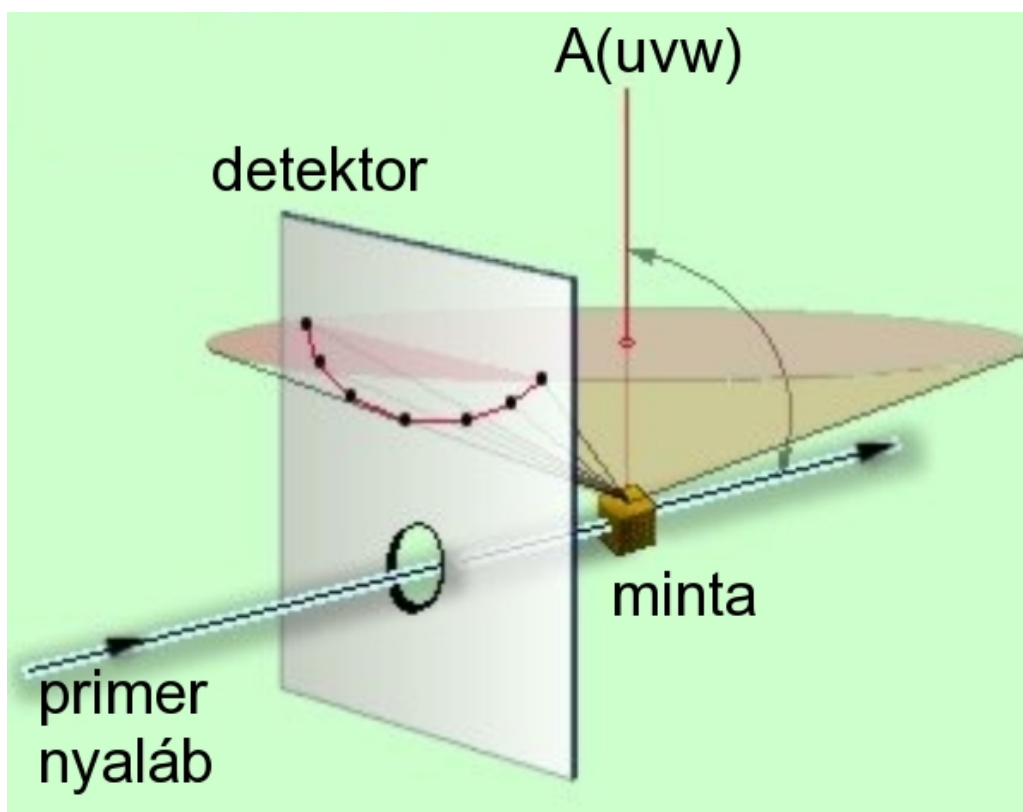
3.a. ábra: A zónatengely és az adott zónához tartozó síkok sematikus képe. Az  $\mathbf{A}_{uvw}$  és a  $\mathbf{H}_{hkl}$  vektorok a zónatengely irányát és a zónához tartozó egyik sík normálisát jelöli.



3.b. ábra: A közös zónatengelyhez tartozó síkokról reflektált sugárzás irányát megadó  $\mathbf{s}$  vektorok egy kúpfelületre illeszkednek, aminek a tengelye az  $\mathbf{A}_{uvw}$  vektorral párhuzamos egyenes.



4.a. ábra. Laue felvétel első reflexiós helyzetben alumínium oxid egykristályról. Látható, hogy a közös zónatengelyhez tartozó síkok reflexiói ellipszisek mentén helyezkednek el.



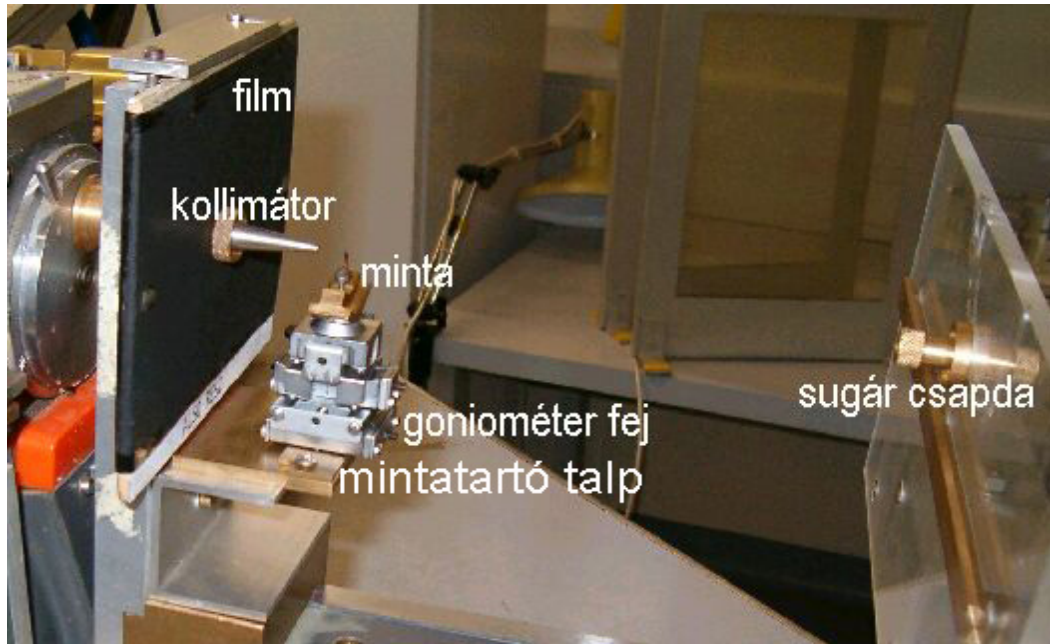
4.b. ábra. Laue felvétel hátsó reflexiós helyzetben szilícium egykristályról. Látható, hogy a közös zónatengelyhez tartozó síkok reflexiói hiperbolák mentén helyezkednek el.



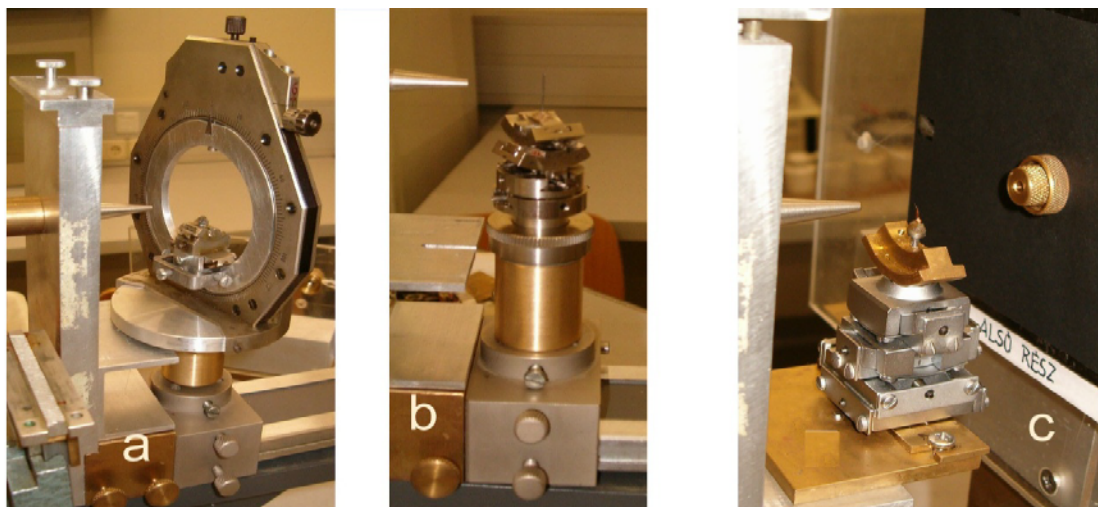
## 2.1. A LAUE BERENDEZÉS FELÉPÍTÉSE

Nagy intenzitású, folytonos spektrumú röntgensugárzás előállítására célszerű magas rendszámú elemből készült anódot használni olyan gyorsító feszültséggel, amely hatására az anódra csapódó elektron energiája nem elég ahhoz, hogy az anód anyagában **erős** karakterisztikus röntgensugárzást gerjesszen. Így folytonos spektrumú fékezési sugárzást kapunk, ami alkalmas a Laue felvételek készítésére.

A mérések az Anyagfizikai Tanszék röntgenlaboratóriumában található Laue berendezéssel készülnek. A készülékkel első- és hátsóreflexiós Laue felvételek készíthetők, röntgen filmre vagy image plate (IP) lemezre. Állandó része a Philips sínre szerelt kollimátor tartó oszlop. Hátsóreflexiós geometriában ez tartja a film- vagy IP kazettát és részben a kis minták goniométer fejeit is (5. ábra). A mintát a filmtől általában 30-40 mm-re helyezzük el. A távolság ismerete fontos. Segédeszköz ehhez egy 30, 33, 40 mm-es távolságellenőrző lapka. A sugár csapda egy hátrahúzható plexi lemezen van, amelyre a nagy, orientálandó kristály szeleteket felrakhatjuk. Elsőreflexiós elrendezésben sugár csapda tartja az IP lemezeket is.



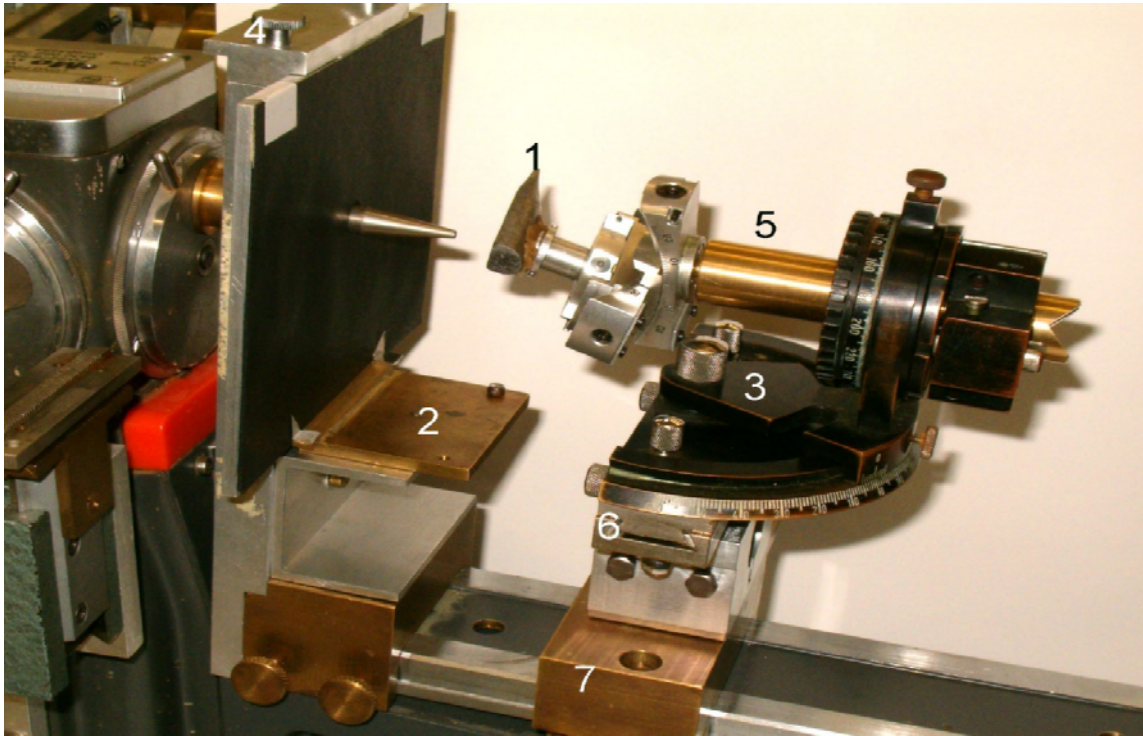
5. ábra: Hátsóreflexiós elrendezés, goniométer fejre tett mintával és a minta mögötti (hátrahúzott) sugár csapdával (a kép jobb oldalán) és a röntgenfilm kazettával. A sugárforrás (röntgenső) a kép bal oldalán helyezkedik el.



6. ábra: A 3''-os mintatartó, dönthető betéttel (a), állítható magasságú tartó a szabványos goniométer fejekhez (b), elsőreflexiós elrendezés, a módosított talpú goniométerfejjel (c)

A kristályok vágását megelőző orientáláshoz különleges, állítható kristálybefogókat használunk, amelyek, a kívánt orientáció beállítása után, átrakhatók a vágógépre. A 7. ábrán bemutatott kristálybefogó, rúd alakú öntecsek számára készült. Más mintákat alkalmas rúd végére kell erősíteni (ragasztani). Ezzel a kristálybefogóval a kristály két, egymásra merőleges tengely körül forgatható és oldalirányban is eltolható. Az eltolásra azért van szükség, mert a rúd kinyúlása miatt a függőleges tengely körüli forgatásnál a rúd vége oldalirányban is elmozdul. A befogott rúd tengelye, vastagságától függően, több mm-re van a „vízszintes” forgás-tengelytől. Ez teszi lehetővé a minta magasságának változtatását.

A mintatartó rúdra goniométer fej is felfogható, a rúd végére szerelt szabványos csatlakozóval, vagy közvetlenül, ha van az alján menetes furat. A nagyobb léptékű oldalirányú mozgás eléréséhez a kristálybefogó számára a Philips sínre olyan kereszttartó (7. ábra, 7) kerül, amelyen az egész kristálybefogó is eltolható, oldalirányban, 40 mm-es lépésekben.



7. ábra: Az IP kazetta és az állítható mintabefogó. (1: minta goniométer fejjel, 2: a mintatartó talp, távolság markerekkel, 3: mintabefogó kéttengelyű forgatással, 4: kazetta leszorító sín, 5: mintatartó rúd, 6: talp a folytonos oldalirányú eltoláshoz, 7: keresztirányú talp 40 mm-enként való eltoláshoz).

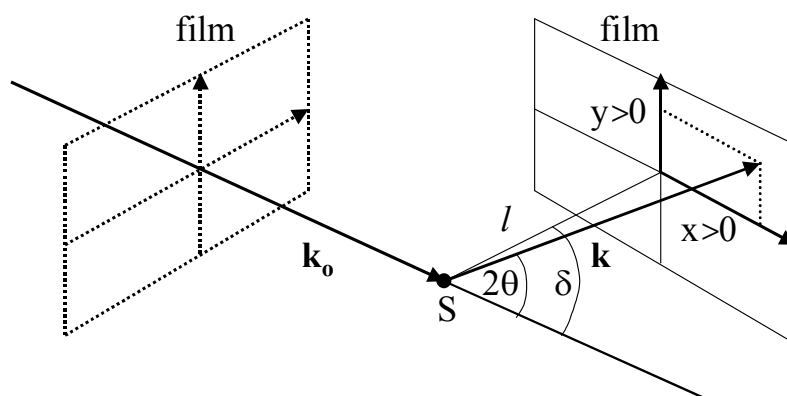
A 10x12,5 cm-es IP lemez egyszerű, kemény hátlaphoz erősített, fekete tasakba kerül. A lemez aszimmetrikusan van lyukasztva (a lyuk kissé a középpont felett van), így orientációja egyértelmű. Felrakásakor, a 7. ábrának megfelelően, a 4 leszorító sínnel és a 2 talppal rögzíteni kell. (Az utóbbi árnyéka a lemezen egyben kalibráló hosszként is használható.) Expozíció előtt a lemezt nem kell sötétben kezelni. A szükséges expozíciós idő néhány perc, kb. tizede a röntgen-filmeknél megszokottnak. Expozíció alatt és után azonban védeni kell a napfénytől és a fénycsöves megvilágítástól, mert az törli az információkat. 30-40 perc alatt a fénycsöves szobavilágítás is teljes törlést végezhet.

Közvetlenül felhasználás előtt kell törölni a lemezt, és az expozíció után mielőbb ki kell kiolvasni. A kiolvasó készülék a vízszintes tengelyre tükrözi a képet, ezért érdemes azt rögtön, újra tükrözve elmenteni. A kiolvasóhoz tartozó programmal javítani lehet a kontrasztot, és mérni lehet kiválasztott pontok távolságát is. A kép mentése az export utasítással történhet.

Kollimátorok:  $\varnothing$  0,5 mm, 80 mm hosszú, (javasolt), 0,4\*2 mm, 80 mm hosszú, és  $\varnothing$  0,5 mm, 65 mm hosszú. A különböző hosszúságú kollimátorok különböző méretű hüvelyekkel csatlakoznak az oszlophoz és a sugárforrás kilépő ablakához.

## 2.2. EGYKRISTÁLYOK ORIENTÁCIÓJÁNAK MEGHATÁROZÁSA LAUE-FELVÉTELBŐL

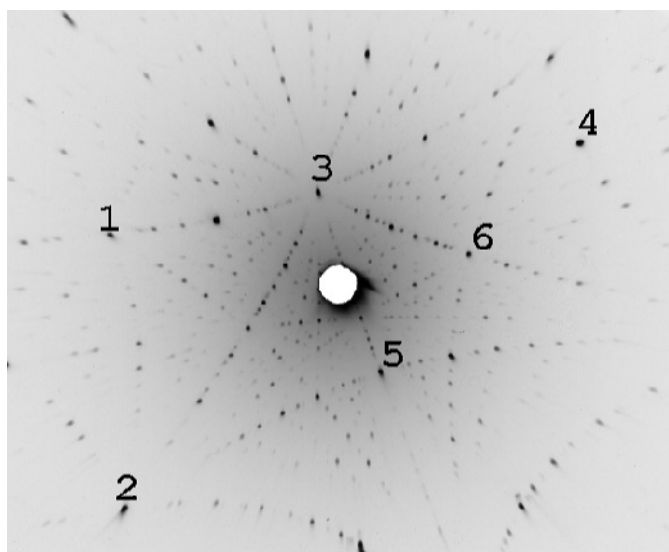
Ha a minta ismert kristályrácsú, akkor bármely helyzetében készült felvétel alapján megállapítható az orientációja, néhány elég pontosan mért reflexió koordinátáiból. Ki lehet számítani ui. páronként a diffrakciós foltokhoz tartozó síknormálisok (a  $\mathbf{g}$  diffrakciós vektorok) hajlásszögeit, és ezt a lehetséges, számított hajlásszögekkel összehasonlítva a Miller-indexek megállapíthatók. E feladat megoldására több számítógépes program létezik. Ismert rácsparaméterű anyagok esetén jól bevált az OrientExpress elnevezésű program [2], amelyet a laborgyakorlat során használunk. Az OrientExpressnek megfelelő mérési elrendezést a 8. ábrán látjuk. Az elhajlási képet a minta közelében, tőle  $l$  távolságra lévő síkfilm rögzíti. A film állhat a primér sugárra merőlegesen első reflexiós helyzetben ( $\delta = 0$ ), vagy hátsó reflexiós helyzetben ( $\delta = 180^\circ$ , az ábrán szaggatott vonallal jelölve), de állhat akár ferdén is ( $0 < \delta < 180^\circ$ , az ábrán folytonos vonallal jelölve).



8. ábra. A koordináta rendszer az OrientExpressnél. S – a mintát jelöli

A minta felől nézve a filmen jobbra mutat az  $x$  tengely és felfelé az  $y$ . Az OrientExpress bemenő adatai a következők: a rácsparaméterek; a tércsoport (ha ismert); a hullámhossz tartomány ( $12,34/U < \lambda [\text{Å}] < 3$  Å, ahol  $U$  a gyorsító feszültség kV-ban);  $l$  és  $\delta$  a 8. ábra szerint; a Miller indexek alsó és felső határa (általában -6 illetve 6); a megengedett hiba fokban. Másik adattömbként 4-6 jól kiválasztott Laue-folt koordinátáit kell megadni cm-ben. (Nem jó a túl sok pont!) Ezeket lemérhetjük közvetlenül a filmről, vagy a programba beolvasható a kép file is, és a képernyőn egérrel határozzuk meg a pontok koordinátáit. Nagyon fontos a foltok jó kiválasztása. A Laue-felvételeken a foltok kúpszeletek mentén helyezkednek el. Olyan foltokat kell keresnünk, amelyek két, vagy több ilyen vonal metszéspontjában vannak. Ezek rendszerint kis indexűek és közvetlen közelükben nincs másik folt (9. ábra). Ellenkező esetben a

program más reflexióra találhat rá, a kiválasztott helyett. Ügyeljünk arra is, hogy lehetőleg minden kép-negyedben legyen kiválasztott folt.



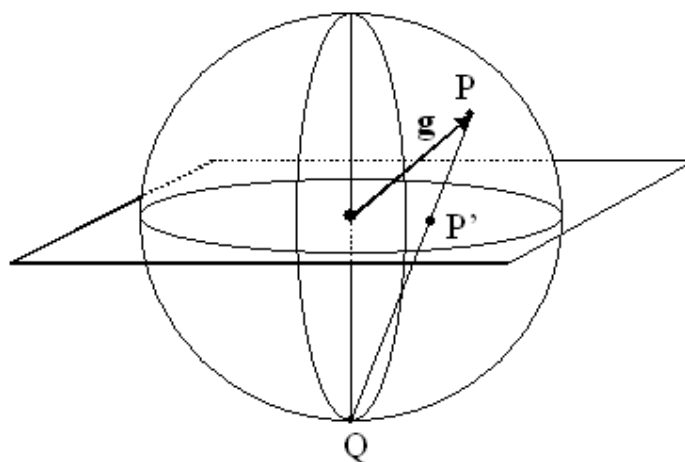
9. ábra. Hátsó reflexiós Laue-felvétel jól kiválasztott, mért pontjai.

A megadott hibahatároktól függően esetleg több megoldást is kaphatunk. A helyes megoldás megtalálását elősegíti, hogy lehetőség van az eredeti és a teljes számított Laue-felvétel összehasonlítására. Az elfogadott orientációnak megfelelő sztereografikus vetületet is felrajzoltathatjuk (lásd a következő szakasz). Mind ezen, mind pedig a Laue-képen megnézhetjük, hogyan változnának azok a minta forgatásával. Így az is könnyen megállapítható, hogy milyen tengelyek körül, mekkora szöggel kellene a mintát elforgatni a kívánt orientáció eléréséhez. Jegyezzük meg, hogy a diffrakciós vektorok mindig a sugárforrás oldali térfélre mutatnak, ezért a szimulált sztereografikus vetület is mindig ilyen irányú vektorokat ábrázol!

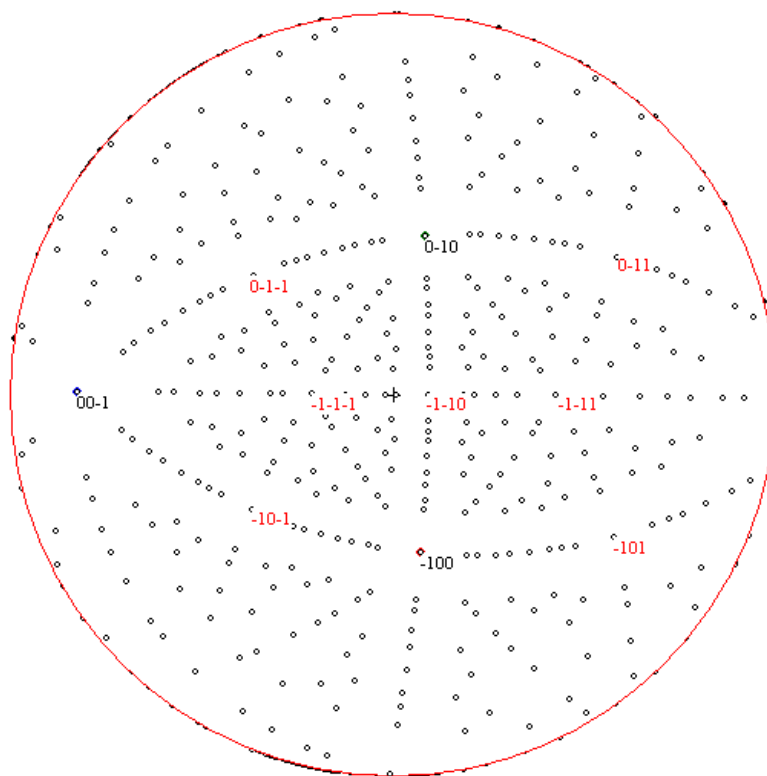
### 2.3. A SZTEREOGRAFIKUS VETÜLET

A sztereografikus vetület a térbeli irányok kétdimenziós ábrázolásának leggyakoribb módja, és lényegében ez történik akkor is, ha a Föld féltekéjét egy kör alakú területen ábrázoljuk. A sztereografikus vetület a kristálytanban is jól használható. Egy – a térben valamilyen módon orientált – kristályhoz tartozó  $\mathbf{g}$  vektorokat is ábrázolhatjuk síkban sztereografikus vetületek segítségével. A féltér minden iránya ( $\mathbf{g}$  vektora) egy pontot ( $P$ ) jelöl ki az egységgömb felületének egyik felén (10. ábra). Nevezhetjük ezt pl. északi félgömbnek, határvonalát pedig egyenlítőnek. Ezt a pontot kell a féltér határoló síkra vetíteni, az ellenkező oldali „déli póluson” ( $Q$ ) átmenő egyenessel. A másik féltér irányait hasonlóképpen az ellenkező irányból vetít-

jük, ha szükséges, de más szimbólumokkal jelöljük, pl. üres és teli körökkel. Ilyen módon az „egyenlítő” síkjában lévő vektorok vetületei pontok az egységkör kerületén. A síkra merőleges irány vetülete a kör középpontjába esik. A sztereografikus vetület legfontosabb tulajdonsága, hogy kör- és szögtartó. A gömbi körök vetülete ugyancsak kör (de a középpont képe nem marad középen). A főkörök képe az egységkör két áttellenes pontja között húzódó ív. Hasonlóképpen az egymást metsző gömbi körök közötti szög is a vetítés során változatlan marad.



10.a. ábra: Egy adott  $g$  vektor sztereografikus vetítésmenete.



10.b. ábra: Egy köbös gyémánt kristály  $g$  vektorainak a sztereografikus vetülete. A sztereografikus ábra körlapjának a középpontja a direktnyalábbal párhuzamos irányt reprezentálja.

#### 4. FELADATOK

1. Ismert szerkezetű köbös egykristályról elhajlási kép felvétele image plate-re.
2. Az image plate-en detektált adatok kiolvasása és egy kiértékelésre alkalmas kép elkészítése.
3. A kiértékeléshez használt diffrakciós foltok kiválasztása, azok koordinátáinak bevitele az OrientExpress nevű programba.
4. A szoftver által adott lehetséges megoldások vizsgálata, a diffrakciós foltok indexelése.
5. A minta néhány fontos kristálytani irányának meghatározása a mintatartó kiválasztott tengelyéhez viszonyítva.
6. A kívánt kristálytani orientációba forgatáshoz szükséges tengelyek és szögek meghatározása.
7. Korund (trigonális szerkezetű  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) egykristályról készült régebbi Laue felvétel kiértékelése az OrientExpress programmal.

#### IRODALOM

1. B. E. Warren: X-ray diffraction (Dover Publications, New York, 1990)
2. <http://www.ccp14.ac.uk/ccp/webb-mirrors/lmgp-laugierr-bochu>