

Vizsgatematika a „Diffrakciós módszerek” és a „Szerkezetvizsgáló módszerek” című előadásokhoz

1. A diffrakció kinematikus elmélete. Patterson-függvény. Szerkezeti tényező, atomszórási tényező. Laue-feltétel. Ewald szerkesztés. Bragg egyenlet. Reciprokrács. Szisztematikus kioltás.
2. A röntgensugárzás előállítása. Röntgen detektorok. Monokromátor. A röntgensugárzás abszorpciója. Debye-Scherrer kamra, pordiffraktométer felépítése.
3. A pordiffraktogramok kiértékelése. Fázisazonosítás. Köbös rács indexelése. Rácsparaméter meghatározása. Egykristálydiffrakció: Laue-módszer. Röntgen-, elektron- és neutrodiffrakció összehasonlítása.
4. Integrális intenzitás porminta esetén. Polarizáció, multiplicitás, Debye-Waller faktor. Abszorpció hatása az integrális intenzitásra. Lorentz-polarizációs faktor.
5. A szemcseméret meghatározása a diffrakciós vonalszélesedésből. Scherrer-egyenlet. Alakfüggvény. Oszlophossz-eloszlás. A térfogattal és a keresztmetszettel súlyozott oszlophossz meghatározása az intenzitásprofil alakjából. Az oszlophossz eloszlás meghatározása. A rácstorzulás hatása a diffrakciós vonalszélesedésre. Warren-Averbach módszer.