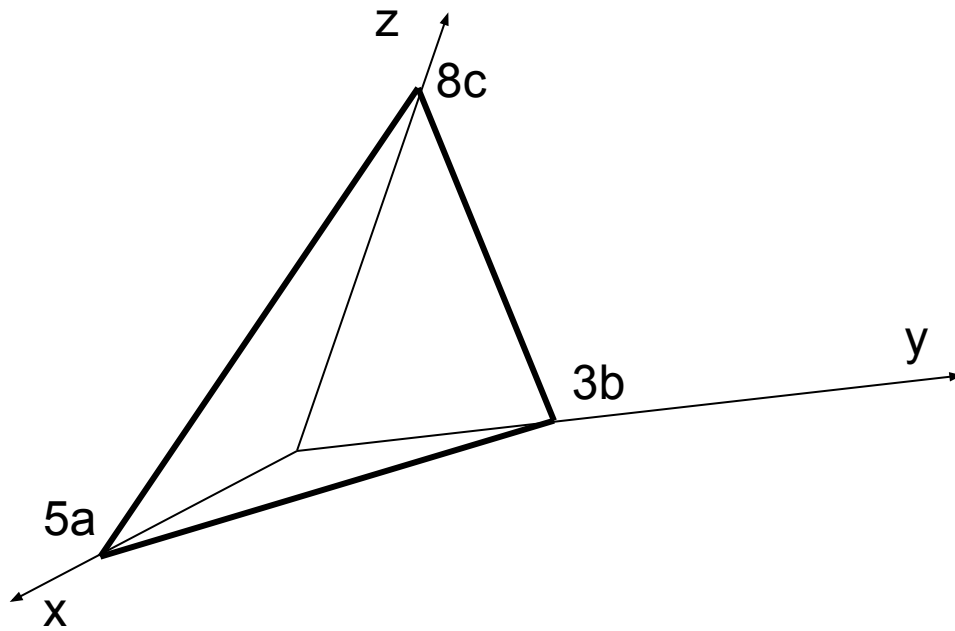


**ПРИМЕРЫ
РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПО КУРСУ
ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ
МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ
РЕАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ
КРИСТАЛЛОВ**

Д.ф.-м.н., проф. Э.В.Суворов

№1. Плоскость отсекает на осях координат отрезки 5, 3, 8 соответственно в параметрах элементарной ячейки a, b, c .
Определить индексы Миллера таких плоскостей.

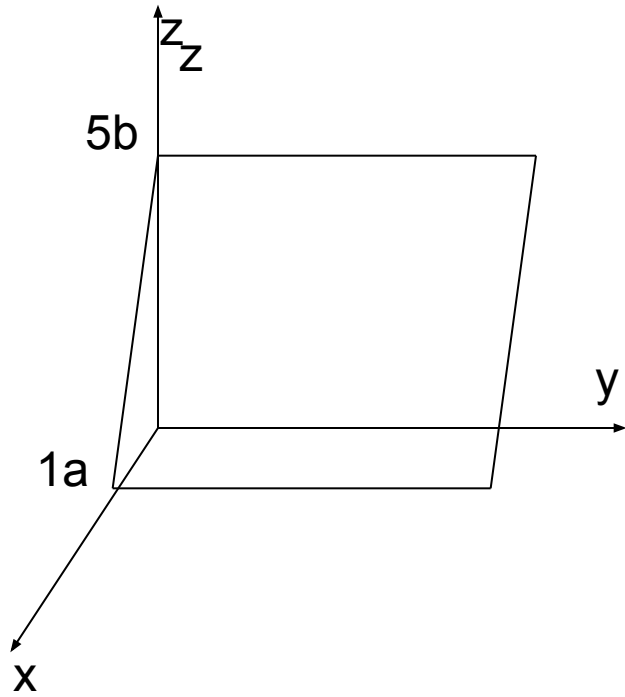


$$h = \frac{a}{5a} r$$

$$k = \frac{b}{3b} r$$

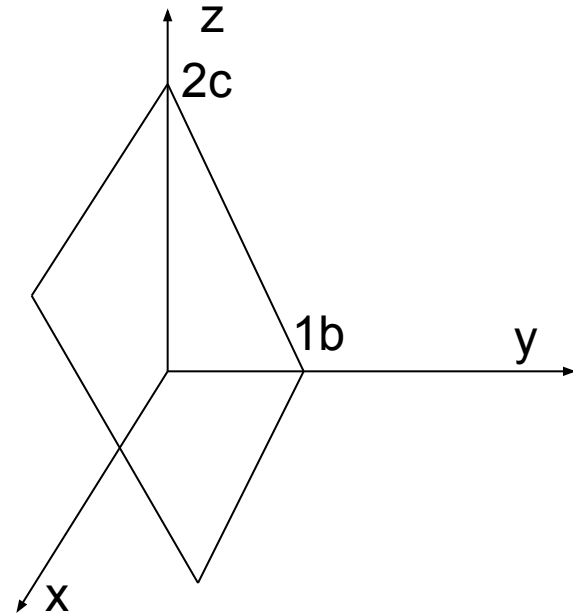
$$l = \frac{c}{8c} r$$

$$\frac{a}{5a}, \frac{b}{3b}, \frac{c}{8c} \rightarrow \frac{1}{5}, \frac{1}{3}, \frac{1}{8} \rightarrow (5 \times 3 \times 8) \times \frac{1}{5}, \frac{1}{3}, \frac{1}{8} \rightarrow (24 \cdot 40 \cdot 15)$$



$$\frac{a}{1a}, \frac{b}{\infty}, \frac{c}{5c} \rightarrow (501)$$

$$(021) \rightarrow \frac{a}{\infty}, \frac{b}{1b}, \frac{c}{2c}$$



Обратная решетка. Её свойства

$$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c} \quad \mathbf{r}_j = \mathbf{a}m + \mathbf{b}n + \mathbf{c}p \quad \text{Здесь } m, n, p \text{ — целые числа}$$

$$\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^* \quad \mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* \quad \text{Здесь } h, k, l \text{ — тоже целые числа}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} (\mathbf{a}, \mathbf{a}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{b}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{c}^*) = 1 \\ (\mathbf{a}, \mathbf{b}^*) = (\mathbf{a}, \mathbf{c}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{a}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{c}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{a}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{b}^*) = 0 \end{array} \right.$$

Например, равенство $(\mathbf{a}, \mathbf{b}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{b}^*) = 0$ говорит о том, что вектор \mathbf{b}^* перпендикулярен к плоскости, в которой лежат вектора \mathbf{a} и \mathbf{c} . Соответственно равенство $(\mathbf{a}, \mathbf{c}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{c}^*) = 0$ указывает на то, что вектор \mathbf{c}^* перпендикулярен к плоскости, в которой лежат вектора, \mathbf{a} и \mathbf{b} . Ну а равенство $(\mathbf{b}, \mathbf{a}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{a}^*) = 0$ свидетельствует о том, что вектор \mathbf{a}^* - перпендикулярен к плоскости, в которой лежат вектора \mathbf{b} и \mathbf{c} . Следовательно, можно записать

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{a}^* = \alpha_1 [\mathbf{bc}] \\ \mathbf{b}^* = \alpha_2 [\mathbf{ca}] \\ \mathbf{c}^* = \alpha_3 [\mathbf{ab}] \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{Здесь } \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 \text{ — неизвестные коэффициенты пропорциональности.} \\ \text{Воспользуемся первым условием для векторов обратной решетки.} \\ \text{Подставим в него полученные нами значения векторов обратной} \\ \text{решетки} \end{array}$$

$$(\mathbf{a}, \mathbf{a}^*) = (\mathbf{b}, \mathbf{b}^*) = (\mathbf{c}, \mathbf{c}^*) = (\mathbf{a}, \alpha_1 [\mathbf{bc}]) = (\mathbf{b}, \alpha_2 [\mathbf{ca}]) = (\mathbf{c}, \alpha_3 [\mathbf{ab}]) = 1$$

Последние три равенства можно переписать так

$$\alpha_1(\mathbf{a}, [\mathbf{bc}]) = \alpha_2(\mathbf{b}, [\mathbf{ca}]) = \alpha_3(\mathbf{c}, [\mathbf{ab}]) = 1$$

Однако из векторной алгебры известно, что смешанное произведение трех векторов $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ образующих параллелепипед равно объему этого параллелепипеда. Т.е.

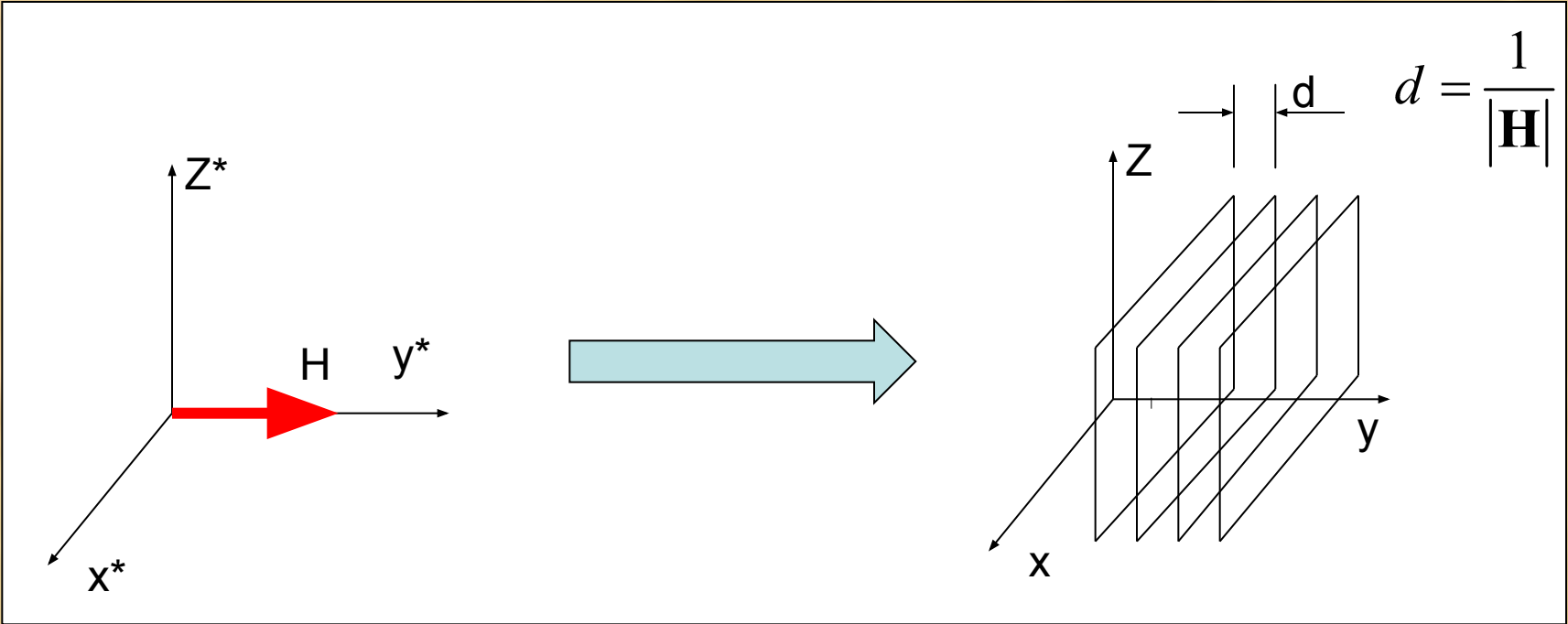
$$V = (\mathbf{a}[\mathbf{bc}]) = (\mathbf{b}[\mathbf{ca}]) = (\mathbf{c}[\mathbf{ab}])$$

Тогда

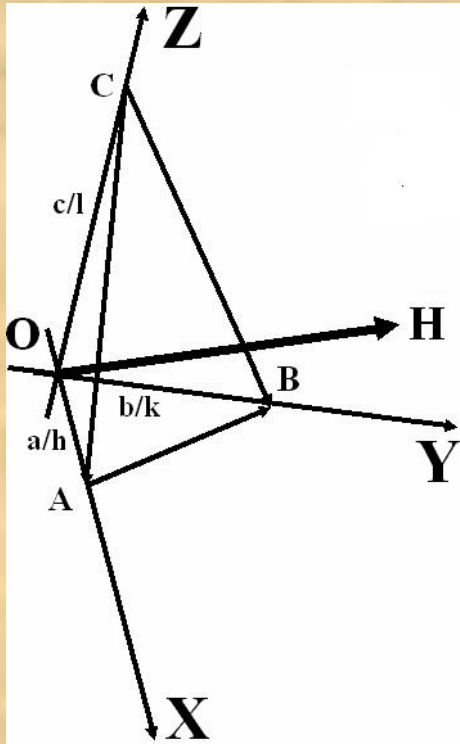
$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \frac{1}{V}$$

$$\begin{cases} \mathbf{a}^* = \frac{1}{V}[\mathbf{bc}] \\ \mathbf{b}^* = \frac{1}{V}[\mathbf{ca}] \\ \mathbf{c}^* = \frac{1}{V}[\mathbf{ab}] \end{cases}$$

№2. Чему в прямой решетке соответствует точка в обратной решетке



№3. Показать, что вектор обратной решетки H_{hkl} перпендикулярен плоскости прямой решетки с индексами (hkl) .



Введем в обратной решетке вектор $\mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$

Этот вектор обладает чрезвычайно важным свойством – он всегда перпендикулярен плоскостям прямой решетки с индексами (hkl) .

Рассмотрим, например, плоскость ABC в прямой решетке с индексами (hkl) . Если вектор \mathbf{H} перпендикулярен к этой плоскости (hkl) , то скалярное произведение любого вектора лежащего в этой плоскости, будет равно нулю. Возьмем для простоты рассмотрения вектор \mathbf{AB} . Он будет определяться как разность двух других векторов .

$$\mathbf{AB} = \mathbf{OB} - \mathbf{OA} = \frac{\mathbf{b}}{k} - \frac{\mathbf{a}}{h}$$

Если вектор \mathbf{H} перпендикулярен этой плоскости, скалярные произведения $(\mathbf{H}, \mathbf{AB})$, $(\mathbf{H}, \mathbf{AC})$, $(\mathbf{H}, \mathbf{CB})$ должны быть равны нулю.

$$\left(\mathbf{H}, \frac{\mathbf{b}}{k} - \frac{\mathbf{a}}{h} \right) = \left(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*, \frac{\mathbf{b}}{k} - \frac{\mathbf{a}}{h} \right) = 1 - 1 = 0$$

№4. Показать, что модуль вектора обратной решетки равен обратной величине межплоскостного расстояния для плоскостей с индексами (hkl) т.е. $|\mathbf{H}| = \frac{1}{d}$

Другим важнейшим свойством вектора \mathbf{H} является то, что его модуль всегда равен обратной величине межплоскостного расстояния для плоскостей с индексами (hkl) .

$$|\mathbf{H}| = \frac{1}{d_{hkl}} \quad \text{Атомную решетку любой симметрии можно представить как набор семейств плоскостей с индексами } (hkl), (h_1k_1l_1), (h_2k_2l_2), \dots$$

$$\mathbf{R} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$$

\mathbf{R} – текущий радиус-вектор точек одной из плоскостей с индексами (hkl)

Тогда уравнение любой такой плоскости можно записать в виде

$$\left(\mathbf{R}, \frac{\mathbf{H}}{|\mathbf{H}|} \right) = sd$$

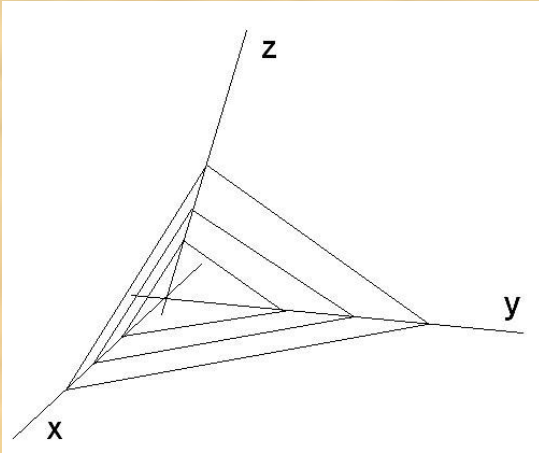
Здесь d – межплоскостное расстояние для этой системы плоскостей, s – целое число (например, для плоскости, проходящей через начало координат $s=0$)

$\frac{\mathbf{H}}{|\mathbf{H}|}$ – единичный вектор нормали к плоскости.

$$sd = \frac{1}{|\mathbf{H}|} (\mathbf{R}, \mathbf{H}) = \frac{1}{|\mathbf{H}|} (m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}, h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) = \frac{1}{|\mathbf{H}|} (mh + nk + pl)$$

Вспоминая, что $(mh+nk+pl)=s$ – уравнение плоскости, получим

$$d = \frac{1}{|\mathbf{H}|}$$



№5. Рассчитать структурную амплитуду для гранецентрированной кубической решетки. Определить закон погасания рефлексов для этой структуры.

Для гранецентрированной кубической решетки базис записывается, как

$$\begin{matrix} \boxtimes \\ \boxtimes \\ \boxtimes \end{matrix} 000, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} \begin{matrix} \boxtimes \\ \boxtimes \\ \boxtimes \end{matrix}$$

Если положить, что все атомы, входящие в кристаллическую решетку, одинаковые, можно записать, что $f_1=f_2=f_3=f_4=f$ и структурная амплитуда

$$F(hkl) = \sum f_j \cdot \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)$$

Подставляя в это выражение координаты базиса гранецентрированной решетки, получим

$$F(hkl) = f \left[1 + \exp \pi i (k+l) + \exp \pi i (h+k) + \exp \pi i (h+l) \right] =$$

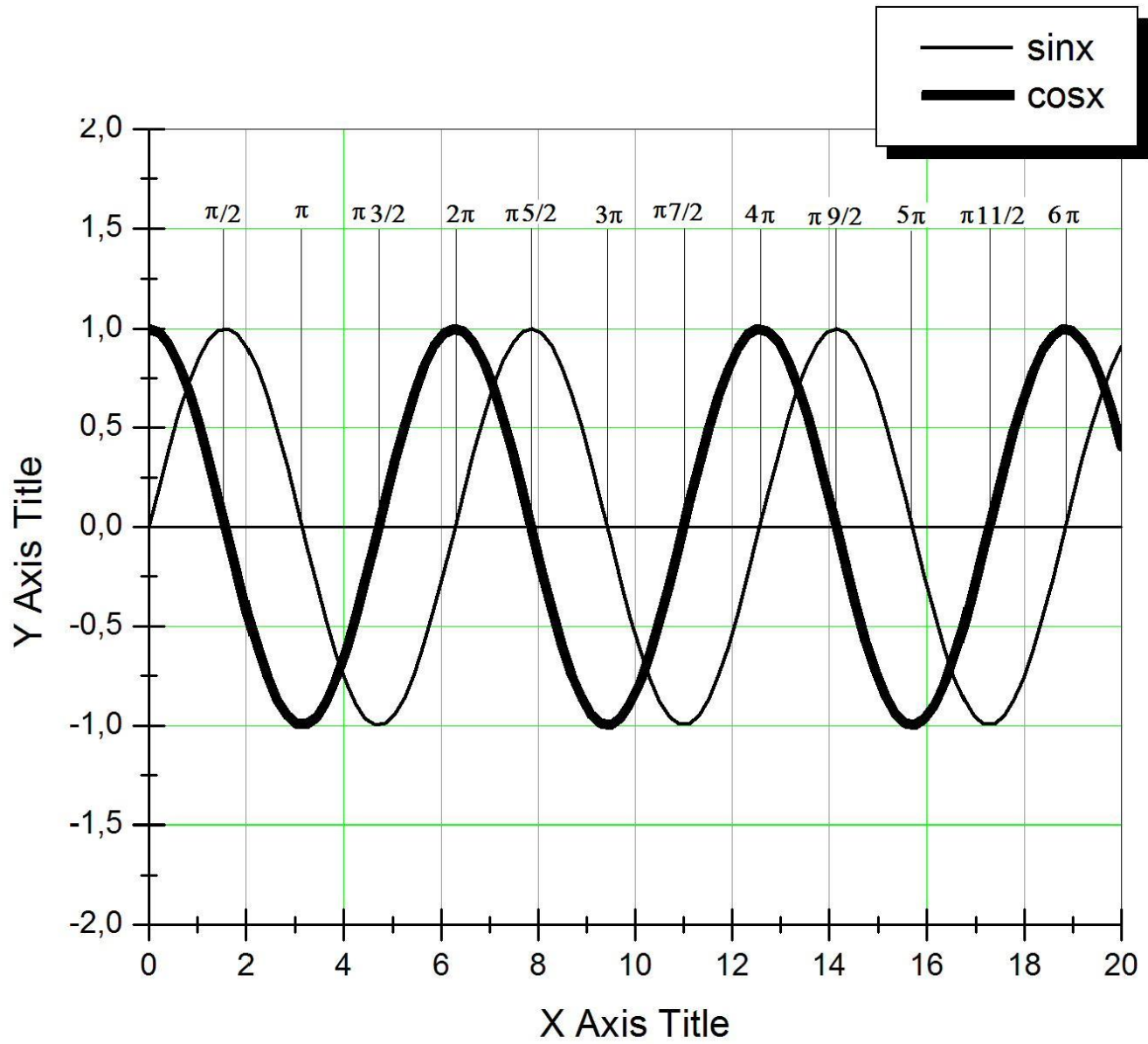
или, вспоминая формулы Эйлера –

$$= f \left[1 + \cos \pi (k+l) + \cos \pi (h+k) + \cos \pi (h+l) \right]$$

Следовательно, правила погасания будут выглядеть как:

если hkl одновременно четные или нечетные, то $F=4f$;

если hkl смешанные, то $F=0$.

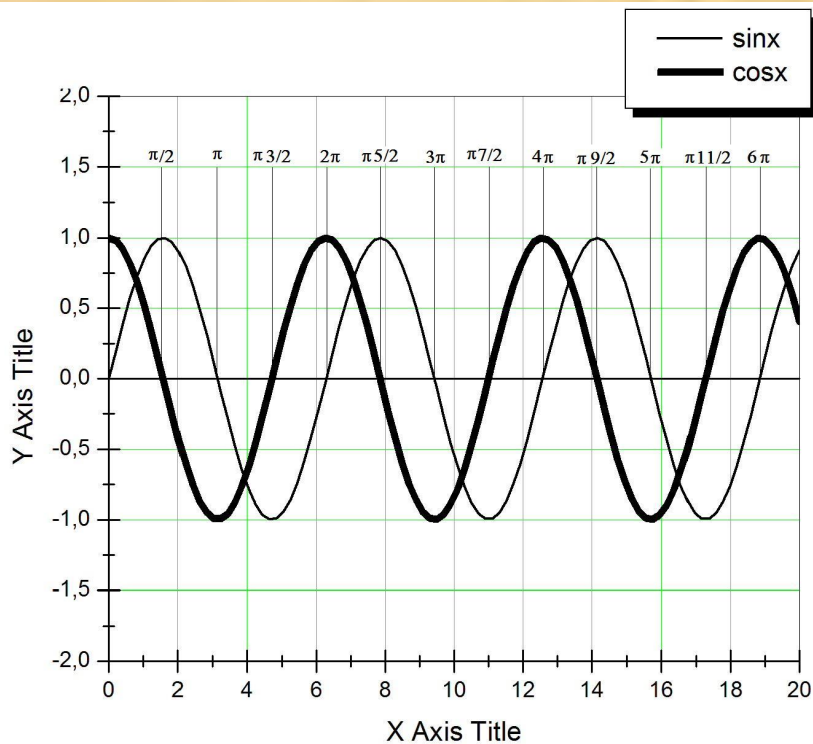


№6. Рассчитать структурную амплитуду для объемноцентрированной кубической решетки.
Определить закон погасания рефлексов для этой структуры.

Объемоцентрированная решетка

$$\left\| \begin{array}{c} \times \\ \times \\ \times \end{array} \right\| 000, \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \left\| \begin{array}{c} \times \\ \times \\ \times \end{array} \right\|$$

$$F = f \left[1 + \exp \pi i (h + k + l) \right] = f \left[1 + \cos \pi (h + k + l) \right]$$



$$F = \begin{cases} 0, & \text{если } h + k + l = 2n + 1 \\ 2f, & \text{если } h + k + l = 2n \end{cases}$$

№7. Рассчитать структурную амплитуду, структурный фактор и определить законы погасаний для решетки алмаза.

Решетка алмаза это две
гранецентрированные решетки сдвинутые
по телесной диагонали на $1/4$ ее длины.

Координаты базиса $[[000; 1/2, 1/2, 0; 1/2, 0, 1/2; 0, 1/2, 1/2; 1/4, 1/4, 1/4; 3/4, 3/4, 1/4; 3/4, 1/4, 3/4; 1/4, 3/4, 3/4]]$.

[[000; 1/2,1/2,0; 1/2,0,1/2; 0,1/2,1/2; 1/4,1/4,1/4; 3/4,3/4,1/4; 3/4,1/4,3/4; 1/4,3/4,3/4]]

$$F(hkl) = \sum_j f_j \exp 2\pi i (u_j h + v_j k + w_j l) =$$

$$\sum_j f_j \cdot \cos \left[2\pi (u_j h + v_j k + w_j l) \right] + i \sum_j f_j \cdot \sin \left[2\pi (u_j h + v_j k + w_j l) \right]$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} (\mathbf{r}, \mathbf{s} - \mathbf{s}_0) = 2\pi (\mathbf{r}, \mathbf{H}) \quad F(hkl) = F_1 + F_1 \cdot e^{2\pi i (\mathbf{r}, \mathbf{H})} = F_1 \cdot (1 + e^{2\pi i (\mathbf{r}, \mathbf{H})}) = F_1 \cdot F_2$$

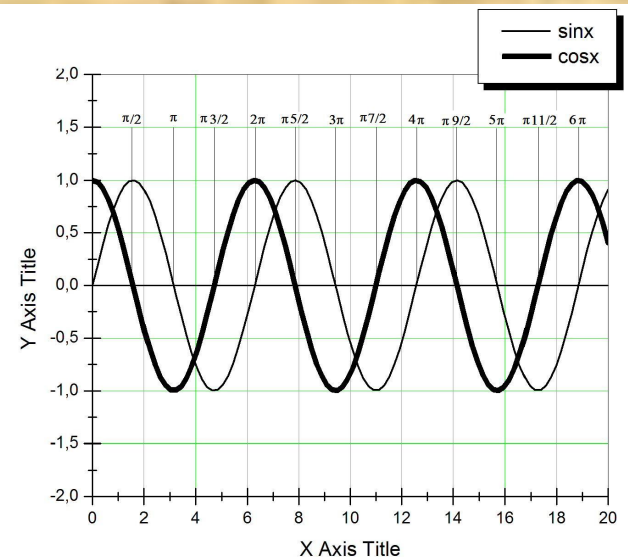
$$F(hkl) = f F_1 F_2 \quad F_1 = 1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)} \quad \text{-гранецентрированная решетка}$$

$$F_2 = 1 + e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}$$

F1=0 для $h+k+l=4n+2$ –

F2=0 Если hkl – числа разной четности.

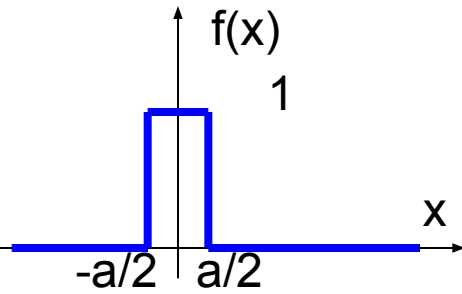
F(hkl)=0 для 200, 222, 410, 600 и т.д.



№8 На щель шириной a падает плоская волна. Рассчитать распределение излучения за этой щелью. (Дифракция на узкой щели).

$$f(x) \quad \mathbf{F}\{f(x)\} = F(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \cdot e^{2\pi i u x} dx$$
$$f(x) = \mathbf{F}^{-1}[\mathbf{F}\{f(x)\}] = \int_{-\infty}^{+\infty} F(u) \cdot e^{-2\pi i u x} dx$$

Запишем выражение, описывающее щель, в виде функции



$$f(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a/2 \\ 1 & |x| \geq a/2 \end{cases}$$

Фурье-образ такой функции будет описываться

$$F(u) = \int_{-a/2}^{a/2} f(x) \cdot e^{2\pi i u x} dx = \int_{-a/2}^{a/2} e^{2\pi i u x} dx$$

Вспоминая, что $\int e^{ax} dx = \frac{1}{a} e^{ax}$, и обозначая $a = 2\pi i u$, можно записать значение интеграла, описывающего Фурье-образ,

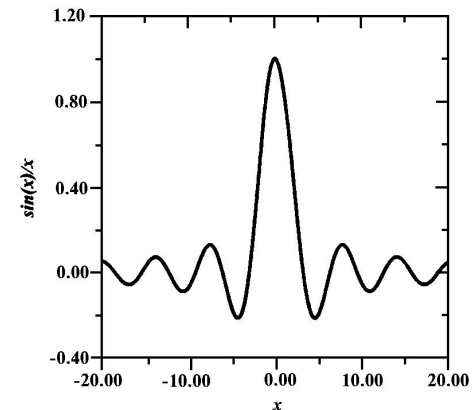
$$\int_{-a/2}^{+a/2} e^{2\pi i u x} dx = \frac{1}{2\pi i u} \cdot \left[e^{2\pi i u \cdot \frac{a}{2}} - e^{-2\pi i u \cdot \frac{a}{2}} \right]$$

или, используя формулы Эйлера, интеграл преобразуется к виду

$$\frac{1}{2\pi i u} \cdot \left[\cos(\pi u a) + i \sin(\pi u a) - \cos(\pi u a) + i \sin(\pi u a) \right] =$$

$$= \frac{1}{2\pi i u} \cdot \left[2i \sin(\pi u a) \right] =$$

$$= \frac{\sin(\pi u a)}{(\pi u)}$$



№9. Определить число атомов в элементарной ячейке железа, кристаллизующегося в кубической системе; ребро куба $a=2,87\text{Å}$, атомный вес железа 55,84; плотность $\rho=7,8\text{г/см}^3$; $m_H=1,65\times 10^{-24}\text{г}$

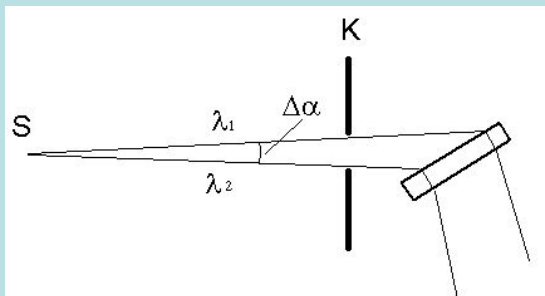
Применяя формулу плотности к элементарной ячейке, находим

$$N = \frac{\rho \cdot a^3}{A \cdot m_H}$$

$$N = \frac{\rho \cdot a^3}{A \cdot m_H} = \frac{7,8 \cdot (2,87)^3 \cdot 10^{-24}}{55,84 \cdot 1,65 \cdot 10^{-24}} \cdot \left[\frac{\cancel{\text{г}} / \text{см}^3 \cdot \text{см}^3}{\cancel{\text{см}^3} \cdot \text{см}^3} \right] \approx 2$$

т.е. на элементарную ячейку приходится 2 атома. Здесь A – атомный вес, m_H – масса атома водорода.

№10. Рассчитать необходимую ширину щели коллиматора для выделения $K\alpha_1$ линии в методе Ланга. Исследуемый кристалл - кремний, $a=5,4306\text{\AA}$; отражение (220); расстояние от источника до выходной щели коллиматора 450мм; источник - точечный. Длины волн $\lambda_{K\alpha_1}=0,70926\text{\AA}$; $\lambda_{K\alpha_2}=0,71354\text{\AA}$



Ширина щели, формирующая пучок, определяет величину расходимости падающего на кристалл пучка. Для того, чтобы исследуемый кристалл отражал только одну длину волны $\lambda_{K\alpha_1}$, необходимо, чтобы угловая ширина падающего на кристалл пучка была меньше углового интервала между отражениями $\lambda_{K\alpha_1}$ и $\lambda_{K\alpha_2}$ (см.рисунок).

Запишем условия Брэгга для этих длин волн $2d \cdot \sin \theta_1 = \lambda_{K\alpha_1}$ $2d \cdot \sin \theta_2 = \lambda_{K\alpha_2}$

Отсюда легко найти разницу между угловыми положениями θ_1 и θ_2 т.е.

$$2d \cos \theta \cdot \delta\theta = \delta\lambda \quad \delta\theta = \frac{\delta\lambda}{2d \cos \theta} = \frac{\delta\lambda}{\cos \theta \lambda / \sin \theta} \quad \delta\theta = \frac{\delta\lambda}{\lambda} \cdot \operatorname{tg} \theta$$

Следовательно, угловая и линейная ширина щели соответственно равны

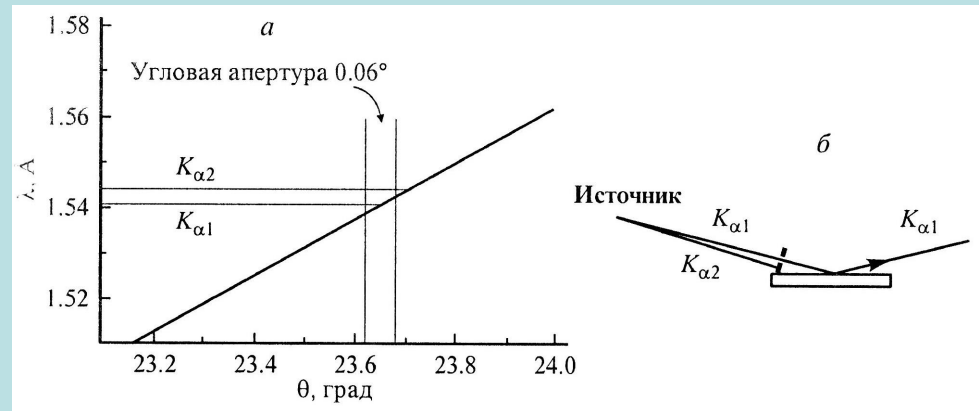
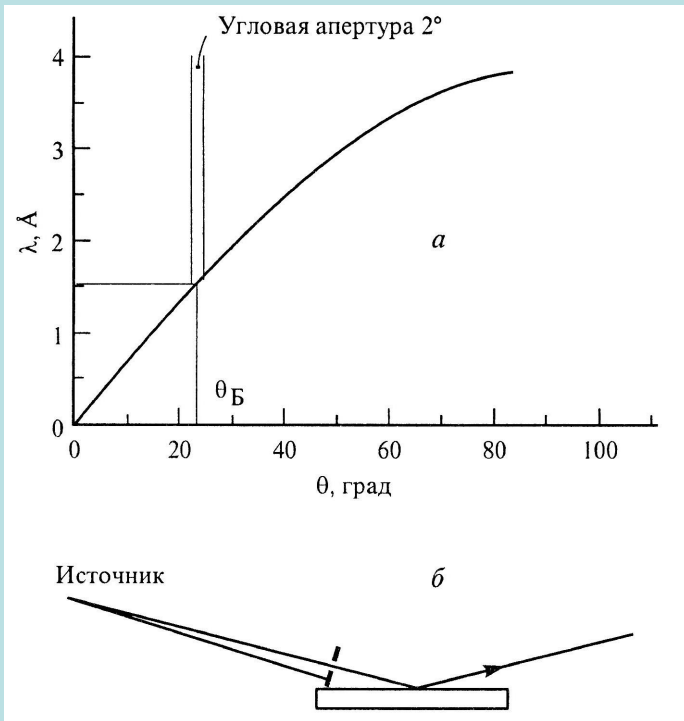
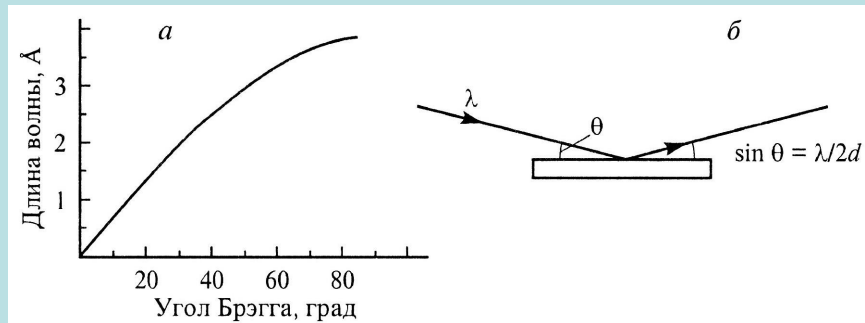
$$\Delta\alpha \approx \delta\theta = \theta_2 - \theta_1 \quad \Delta = \Delta\alpha \cdot D$$

Определяя значение тангенса угла Брэгга и подставляя его в приведенное выше выражение, получим

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{\sin \theta}{\cos \theta} = \frac{0.711\sqrt{2}}{5.4306\sqrt{1 - (0.711\sqrt{2}/5.4306)^2}} = 0.188$$

и, следовательно, ширина щели равна $\Delta = \frac{(0.71354 - 0.709926)}{0.711} \cdot 0.188 \cdot 450 = 0.509 \text{ mm}$

Основные идеи диаграмм Дю Монда



№11. Определить экстинкционную длину для отражения (220) кремния (излучения $\text{MoK}_{\alpha 1}$ и $\text{CuK}_{\alpha 1}$). Фурье-компонента поляризуемости для этого случая (MoK_{α}) $\chi_{(220)} = (2.04 + i0.017)10^{-6}$. Фурье-компонента поляризуемости для этого случая (CuK_{α}) $\chi_{(220)} = (9.74 + i0.340)10^{-6}$. Параметр решетки для кремния $a = 5,4306 \text{ \AA}$, длины волн соответственно равны $\lambda_{\text{MoK}\alpha 1} = 0.70926 \text{ \AA}$, $\lambda_{\text{CuK}\alpha 1} = 1.54051 \text{ \AA}$

Экстинкционная длина определяется соотношением $\Lambda = \frac{2\pi}{|\Delta\mathbf{K}|} = \frac{\lambda \cos\theta}{c\sqrt{\chi_H\chi_{\bar{H}}}}$,

где χ_H и $\chi_{\bar{H}}$ - Фурье-компоненты поляризуемости кристалла для данной системы плоскостей. Если кристалл центросимметричный, $\chi_H = \chi_{\bar{H}}$

Параметр c – фактор поляризации. Если вспомнить, что $\sin\theta = \frac{\lambda}{2d}$, а d для

кубического кристалла определяется квадратичной формой – $\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$

$$\cos\theta = \sqrt{1 - \sin^2\theta} = \sqrt{1 - \frac{\lambda^2}{4d^2}} = \sqrt{1 - \frac{\lambda^2(h^2 + k^2 + l^2)}{4a^2}},$$

тогда для излучения $\text{MoK}\alpha$ $\cos\theta = \sqrt{1 - \frac{0.711^2 \cdot 8}{4 \cdot 5.4306}} = 0.902$ и соответственно

экстинкционная длина будет равна

$$\Lambda = 0.711 \frac{0.902}{2.04 \cdot 10^{-6}} = 3.144 \cdot 10^5 \text{ \AA} = 3.144 \cdot 10^{-5} \text{ м} = 31,44 \text{ мкм}$$

Для излучения $\text{CuK}\alpha$,
а экстинкционная длина будет равна

$$\cos\theta = \sqrt{1 - \frac{1.54^2 \cdot 8}{4 \cdot 5.4306}} = 0.355$$

$$\Lambda = 1.54 \frac{0.355}{9.74 \cdot 10^{-6}} = 5.615 \cdot 10^3 \text{ \AA} = 5.615 \cdot 10^{-7} \text{ м} = 0.5615 \text{ мкм}$$

№12. Оценить толщину кристалла кремния, при которой соотношение амплитуд нормальной и аномальной волн для симметричного отражения (220) на излучении MoK_α будет составлять 1/10. Фурье-компонента поляризуемости кристалла для этого случая $\chi_{(220)} = (2.04 + i0.017)10^{-6}$. Нулевой член Фурье-компоненты поляризуемости кристалла для этого случая $\chi_0 = (3.156 + i0.0162)10^{-6}$. Параметр решетки для кремния составляет $a = 5,4306 \text{ \AA}$.

Величины поглощения для нормальной и аномальной волн задаются соотношением

$$\mu_{1,2} = \frac{\mu_0}{\cos \theta} \cdot \left(1 \pm c \frac{\chi_{ih}}{\chi_{i0}} \right)$$

Знак плюс относится к поглощению нормальной моды. Здесь $\mu_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \chi_{i0}$ - фотоэлектрическая часть поглощения.

Запишем интенсивности нормальной и аномальной волн в зависимости от толщины кристаллов

$$I_1 = I_0 \cdot \exp(-\mu_1 t) \quad I_2 = I_0 \cdot \exp(-\mu_2 t) \quad \text{Тогда}$$

$\ln(I_1 / I_2) = (\mu_2 - \mu_1) \cdot t$ и следовательно искомая толщина равна

$$t = \frac{\ln(I_1 / I_2)}{(\mu_2 - \mu_1)}$$

Числитель этого выражения задан условием задачи.
Знаменатель задается выражением

$$\mu_2 - \mu_1 = \frac{2\pi\chi_{i0}}{\lambda \cos \theta} \cdot \left(1 + c \frac{\chi_{ih}}{\chi_{i0}} - 1 + c \frac{\chi_{ih}}{\chi_{i0}} \right) = \frac{4\pi c}{\lambda \cos \theta} \cdot \chi_{ih}$$

$$t = \frac{\ln(10) \cdot 0,711 \cdot \sqrt{1 - 0,185^2}}{4\pi \cdot 0,017 \cdot 10^{-6}} = 7,531 \cdot 10^6 \text{ \AA} \quad 7,531 \times 10^{-4} \text{ м} = 7.531 \times 10^2 \text{ мкм}$$

№13. Определить все элементы симметрии куба.
Изобразить это на стереографической проекции

Элементы симметрии кубического кристалла

