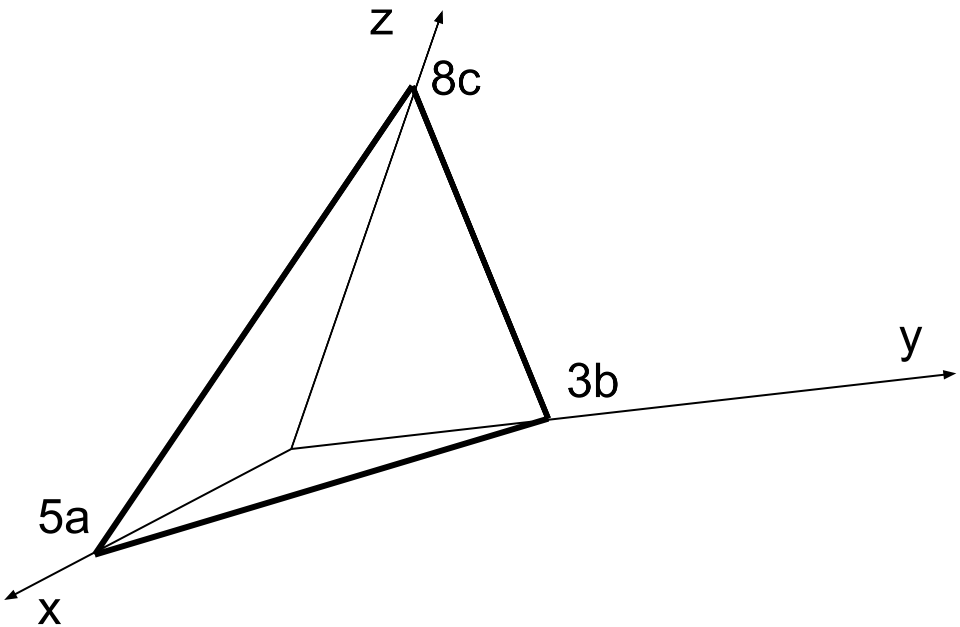
ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПО КУРСУ ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ РЕАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ

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.

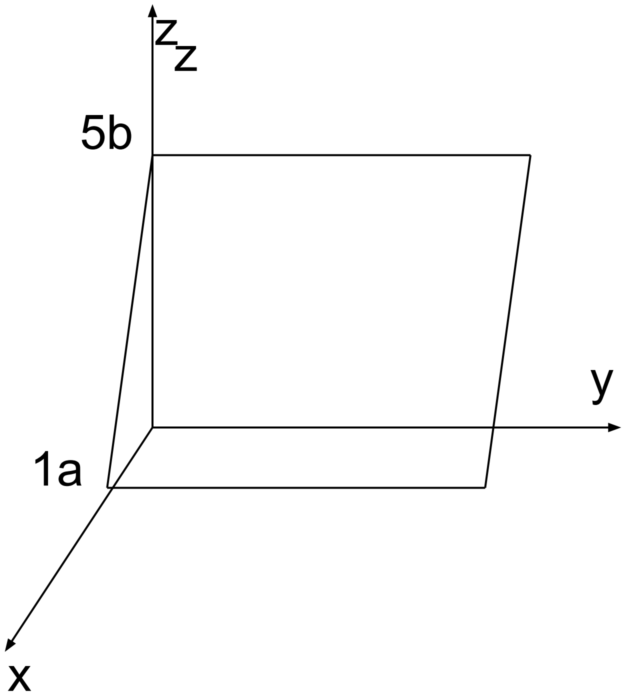


$$h = \frac{a}{5a} r$$

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

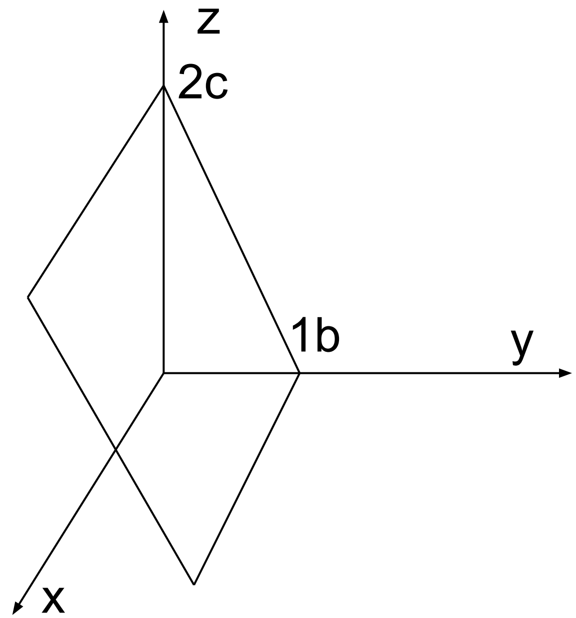
$$l = \frac{c}{8c} r$$

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



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

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



Обратная решетка. Её свойства

$$\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c} \qquad \mathbf{r}_\mathrm{j} = \mathbf{a}m + \mathbf{b}n + \mathbf{c}p$$

Здесь *m,m,p*–целые числа

$$\mathbf{a}^*,\mathbf{b}^*,\mathbf{c}^* \qquad \mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$$

Здесь *h,k,l* – тоже целые числа

$$\begin{cases} (\mathbf{a},\mathbf{a}^*) = (\mathbf{b},\mathbf{b}^*) = (\mathbf{c},\mathbf{c}^*) = 1 \\ (\mathbf{a},\mathbf{b}^*) = (\mathbf{a},\mathbf{c}^*) = (\mathbf{b},\mathbf{a}^*) = (\mathbf{b},\mathbf{c}^*) = (\mathbf{c},\mathbf{a}^*) = (\mathbf{c},\mathbf{b}^*) = 0 \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} \mathbf{a}^* = \alpha_1[\mathbf{bc}] \\ \mathbf{b}^* = \alpha_2[\mathbf{ca}] \\ \mathbf{c}^* = \alpha_3[\mathbf{ab}] \end{cases}$$

Здесь $\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3$ неизвестные коэффициенты пропорциональности. Воспользуемся первым условием для векторов обратной решетки. Подставим в него полученные нами значения векторов обратной решетки

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

Последние три равенства можно переписать так

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

Однако из векторной алгебры известно, что смешанное произведения трех векторов **a,b,c** образующих параллелепипед равно объему этого параллелепипеда. Т.е.

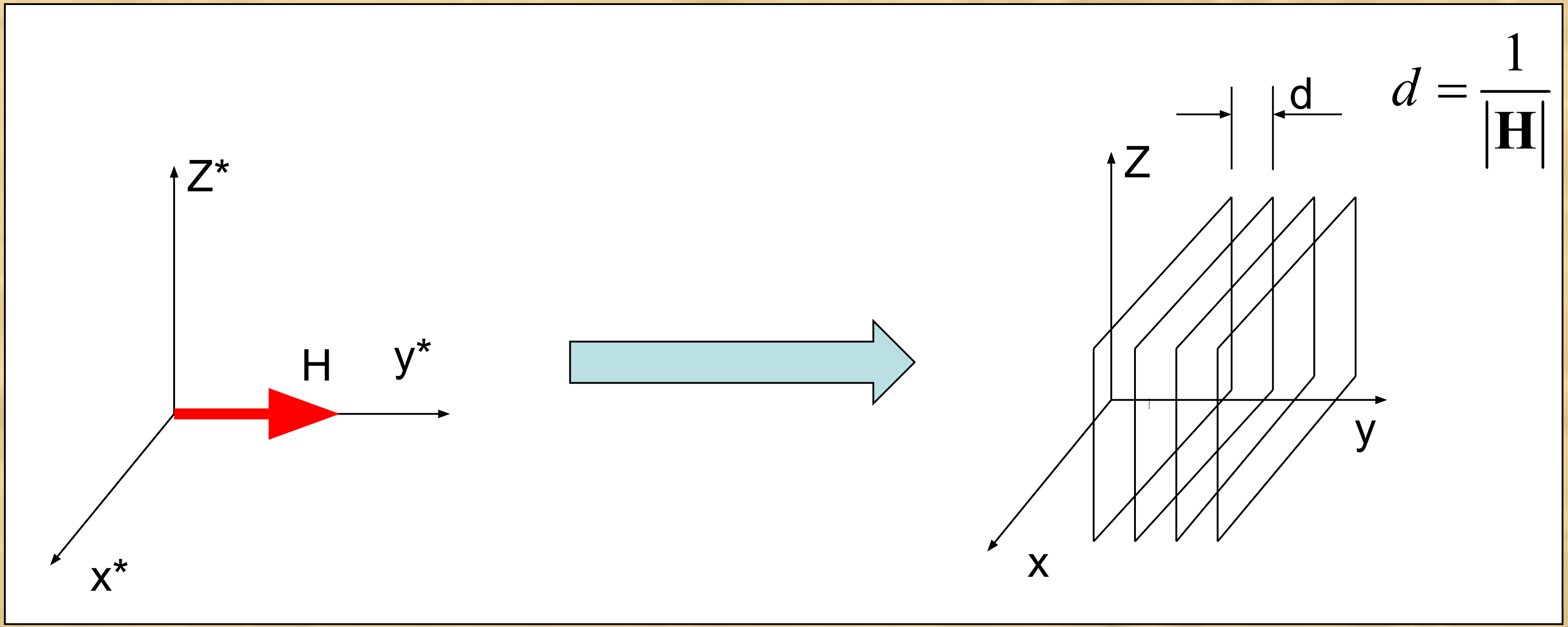
$$V=\left(\mathbf{a}[\mathbf{bc}]\right)=\left(\mathbf{b}[\mathbf{ca}]\right)=\left(\mathbf{c}[\mathbf{ab}]\right)$$

Тогда

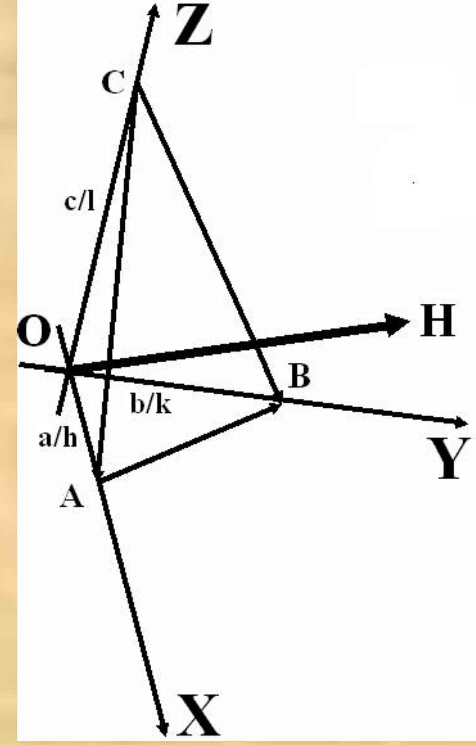
$$\alpha_1=\alpha_2=\alpha_3=\frac{1}{V}$$

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

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


Z*
H
y*
x*
d
Z
y
x
$d = \frac{1}{|\mathbf{H}|}$

№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*).

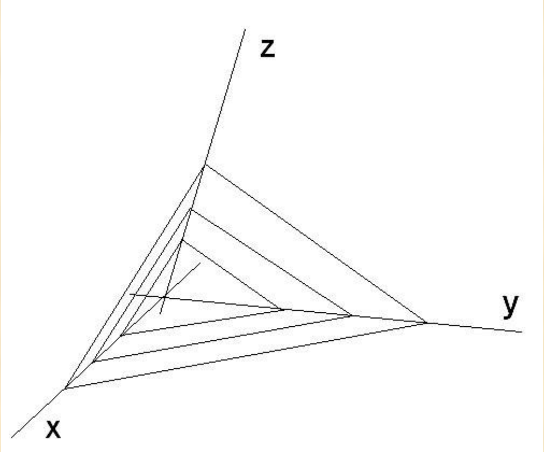
Рассмотрим, например, плоскость АВС в прямой решетке с индексами (*hkl*). Если вектор **Н** перпендикулярен к этой плоскости (*hkl*), то скалярное произведение любого вектора лежащего в этой плоскости, будет равно нулю. Возьмем для простоты рассмотрения вектор **АВ**. Он будет определяться как разность двух других векторов .

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

Если вектор **Н** перпендикулярен этой плоскости, скалярные произведения (**Н,АВ**), (**Н,АС**), (**Н,СВ**) 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 плоскосей с индексами (hkl) т.е. $|\mathbf{H}| = \dfrac{1}{d}$



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

$$\left|\mathbf{H}\right| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

Атомную решетку любой симметрии можно представить как набор семейств плоскостей с индексами (*hkl*), ($h_1k_1l_1$), ($h_2k_2l_2$), ….

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

R – текущий радиус-вектор точек одной из плоскостей с индексами (hkl)

Тогда уравнение любой такой плоскости можно записать в виде

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

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

$\dfrac{\mathbf{H}}{\left|\mathbf{H}\right|}$ - единичный вектор нормали к плоскости.

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

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

$$\boxed{d = \frac{1}{\left|\mathbf{H}\right|}}$$

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

Для гранецентрированной кубической решетки базис записывается, как

$$\left\{000, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}\right\}$$

Если положить, что все атомы, входящие в кристаллическую решетку, одинаковые, можно записать, что *f1=f2=f3=f4=f* и структурная амплитуда

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

Подставляя в это выражение координаты базиса гранецентрированной решетки, получим

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

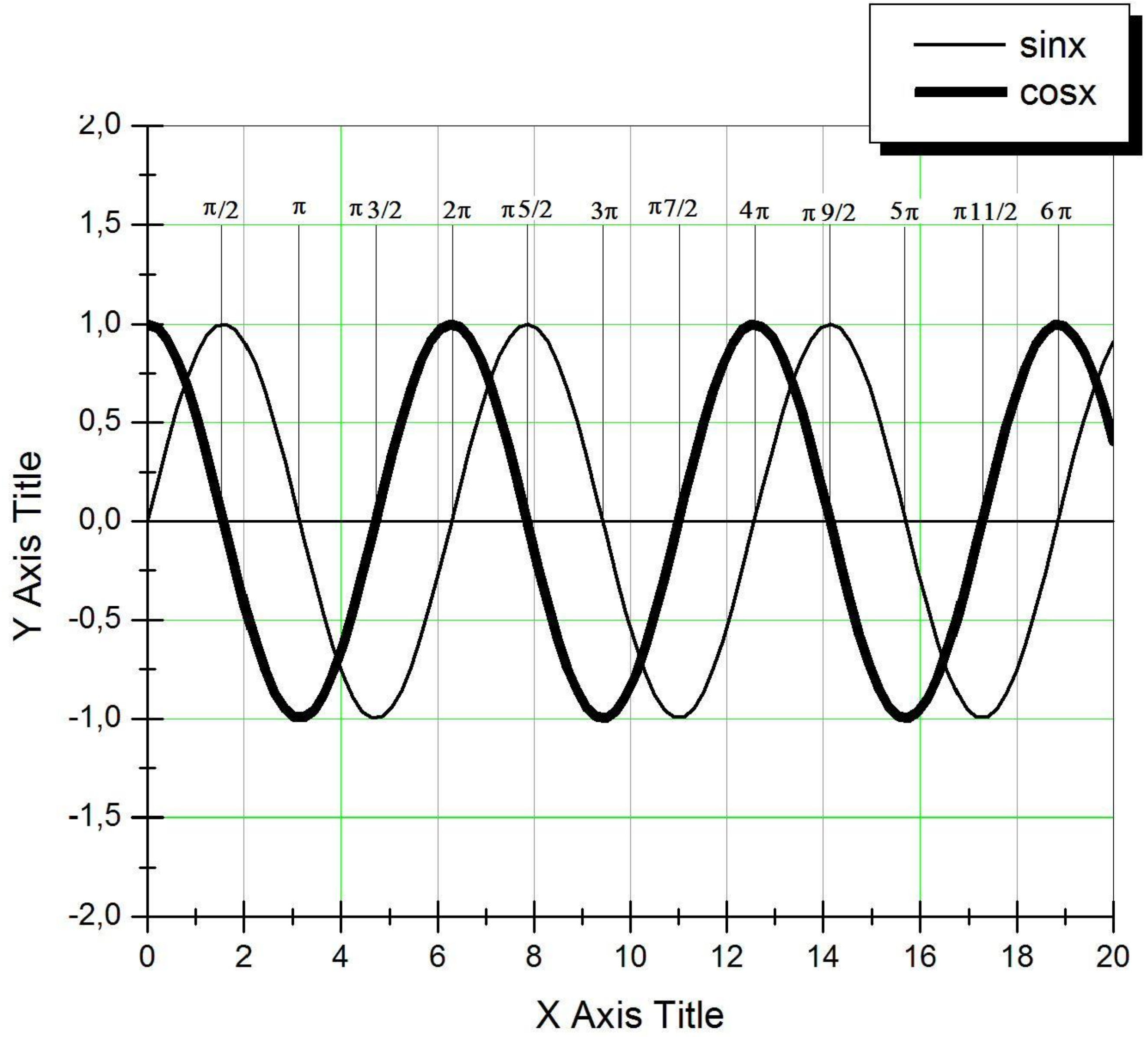
или, вспоминая формулы Эйлера –

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

Следовательно, правила погасания будут выглядеть как:

если hkl одновремнно четные или нечетные, то *F=4f;*

если hkl смешанные, то *F=0.*

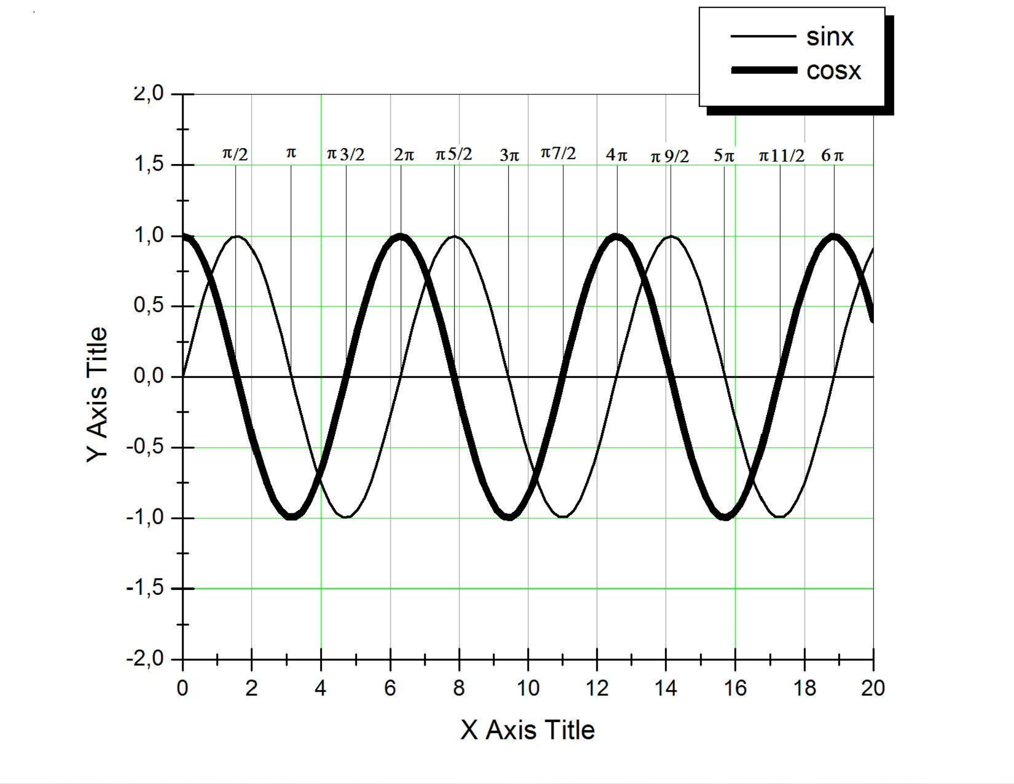


sinx
cosx
2,0
1,5
1,0
0,5
0,0
-0,5
-1,0
-1,5
-2,0
π/2
π
π 3/2
2π
π 5/2
3π
π7/2
4π
π 9/2
5π
π11/2
6 π
0
2
4
6
8
10
12
14
16
18
20
Y Axis Title
X Axis Title

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

Объемоцентрированная решетка $\left[000, \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}\right]$

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



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

№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]]

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

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

$$\frac{2\pi}{\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{s}-\mathbf{s_0}) = 2\pi(\mathbf{r}, \mathbf{H}) \qquad F(\mathrm{hkl}) = F_1 + F_1 \cdot e^{2\pi i(\mathbf{r},\mathbf{H})} = F_1 \cdot \left(1 + e^{2\pi i(\mathbf{r},\mathbf{H})}\right) = F_1 \cdot F_2$$

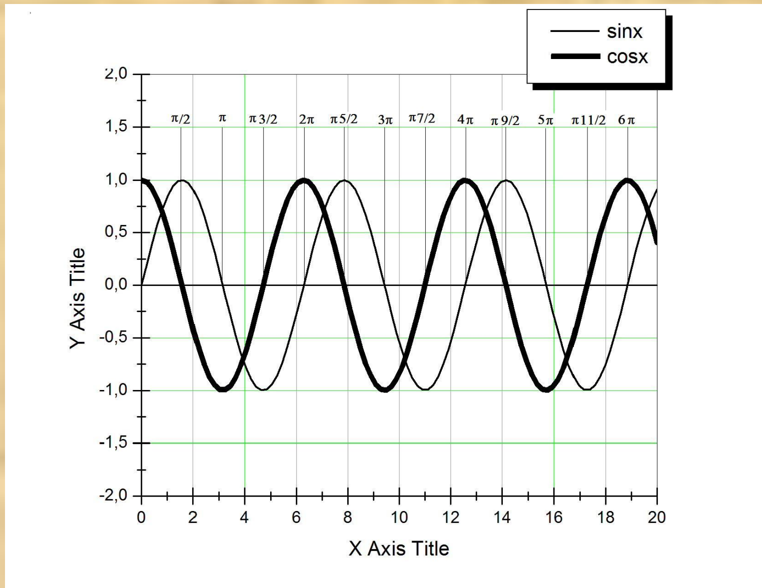
$$F(hkl) = fF_1F_2 \qquad F_1 = 1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+k)} \qquad F_2 = 1 + e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}$$

-гранецентрированная решетка

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.

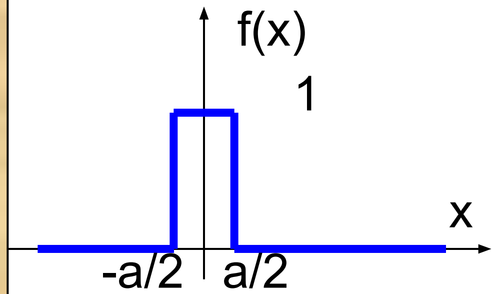


№8 На щель шириной a падает плоская волна. Рассчитать распределение излучения за этой щелью. (Дифракция на узкой щели).

$$f\left(x\right)$$

$$\mathsf{F}\left\{f\left(x\right)\right\} = F\left(u\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} f\left(x\right)\cdot e^{2\pi iux}dx$$

$$f\left(x\right) = \mathsf{F}^{-1}\left[\mathsf{F}\left\{f\left(x\right)\right\}\right] = \int_{-\infty}^{+\infty} F\left(u\right)\cdot e^{-2\pi iux}dx$$



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

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

Вспоминая, что $\int e^{ax}dx=\frac{1}{a}e^{ax}$, и обозначая $a=2\pi iu$, можно записать значение

интеграла, описывающего Фурье-образ,

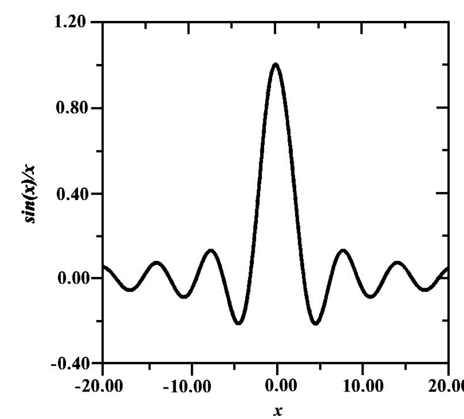
$$\int_{-a/2}^{+a/2} e^{2\pi iux}dx=\frac{1}{2\pi iu}\cdot\left[e^{2\pi iu\cdot\frac{a}{2}}-e^{-2\pi iu\cdot\frac{a}{2}}\right]$$

или, используя формулы Эйлера, интеглал преобразутся к виду

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

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

$$\boxed{=\frac{\sin(\pi ua)}{(\pi u)}}$$



№9. Определить число атомов в элементарной ячейке железа, кристаллизующегося в кубической системе; ребро куба a=2,87Å, атомный вес железа 55,84; плотность ρ=7,8г/см3; $m_H=1,65\times10^{-24}$г

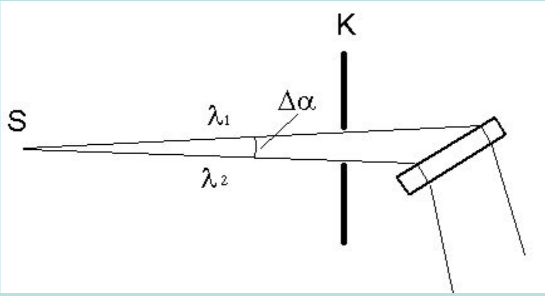
Применяя формулу плотности к элементарной ячейке, находим

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

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

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

№10. Рассчитать необходимую ширину щели коллиматора для выделения Kα1 линии в методе Ланга. Исследуемый кристалл - кремний, a=5,4306Å; отражение (220); расстояние от источника до выходной щели коллиматора 450мм; источник - точечный. Длины волн $\lambda_{K\alpha1}$=0,70926Å; $\lambda_{K\alpha2}$=0,71354Å



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.

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

Следовательно, угловая и линейная ширина щели соответственно равны

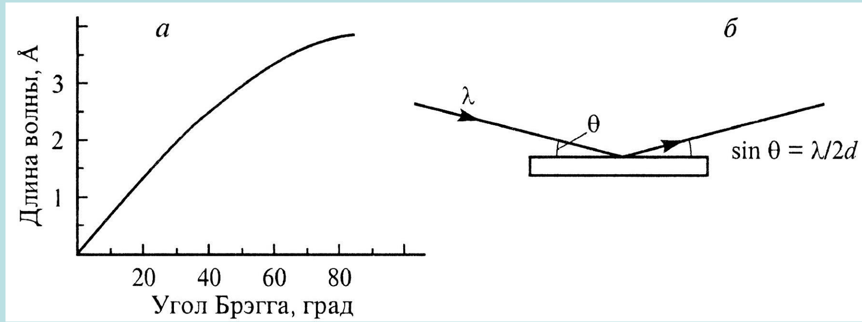
$$\Delta\alpha \approx \delta\theta = \theta_2 - \theta_1 \qquad \Delta = \Delta\alpha \cdot D$$

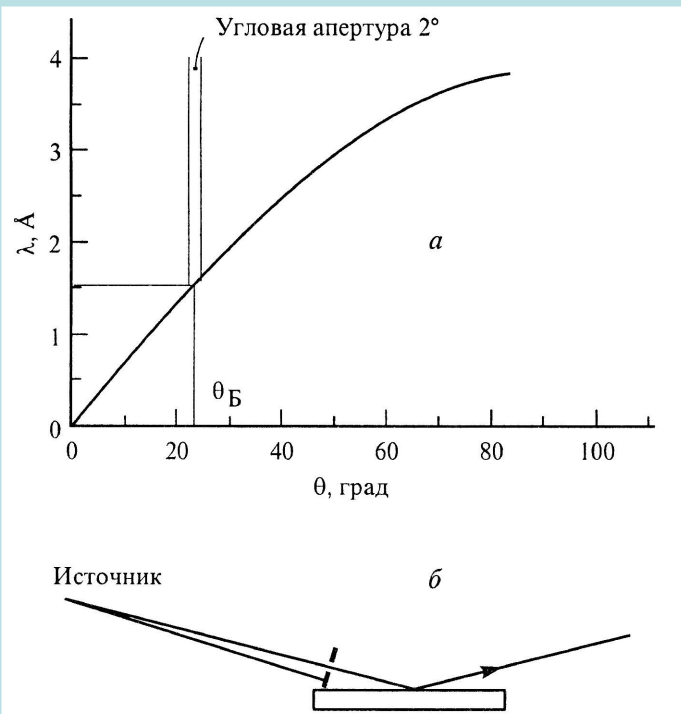
Определяя значение тангенса угла Брэгга и подставляя его в приведенное выше выражение, получим

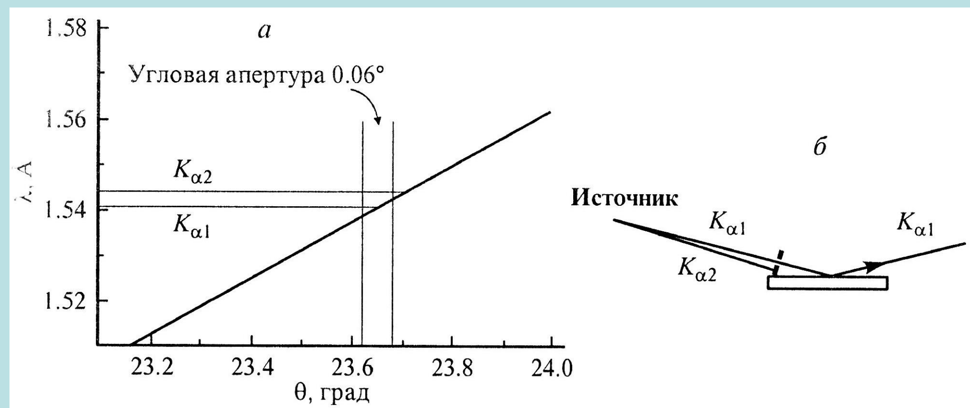
$$tg\theta = \frac{\sin\theta}{\cos\theta} = \frac{0.711\sqrt{2}}{5.4306\sqrt{1-\left(0.711\sqrt{2}/5.4306\right)^2}} = 0.188$$

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

Основные идеи диаграмм Дю Монда







DuMond J.W. Phys. Rev. (1937), 52, p.872

№11. Определить экстинкционную длину для отражения (220) кремния (излучения $MoK_{\alpha 1}$ и $CuK_{\alpha 1}$). 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=5,4306Å, длины волн соответственно равны $\lambda_{MoK\alpha 1}$=0.70926Å, $\lambda_{CuK\alpha 1}$=1.54051Å

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 с – фактор поляризации . Если вспомнить, что $\sin\theta = \frac{\lambda}{2d}$, а d для кубического кристалла определяется квадратичной формой – $\frac{1}{d^2} = \frac{h^2+k^2+l^2}{a^2}$

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

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

экстинкционная длина будет равна

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

Для излучения CuKα ,
а экстинкционная длина будет равна

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

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

№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=5,4306Å.

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

$$I_1 = I_0 \cdot \exp\left(-\mu_1 t\right) \quad I_2 = I_0 \cdot \exp\left(-\mu_2 t\right)$$ Тогда

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

$$t = \frac{\ln\left(I_1 / I_2\right)}{\left(\mu_2 - \mu_1\right)}$$ Числитель этого выражения задан условием задачи. Знаменатель задается выражением

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

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

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

Элементы симметрии кубического кристалла