Практическая работа №3

Группы симметрии и операции. Прямая и обратная решетки.

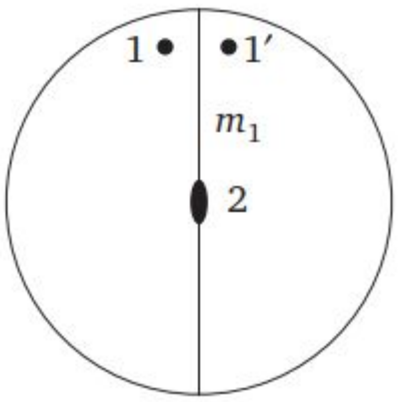
Дифракция

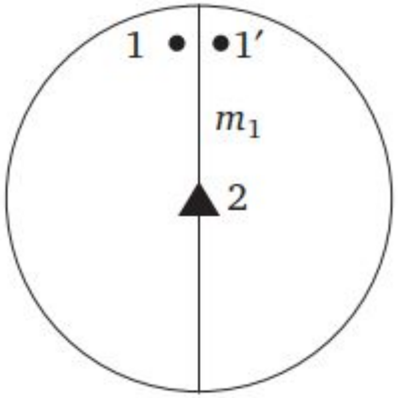
Задача 1. Группы симметрии, операции симметрии

Имеется ось симметрии *n*-го порядка и плоскость симметрии, параллельная этой оси. Какие возникнут новые элементы симметрии (точечные группы) в результате взаимодействия названных элементов симметрии, если даны:

а) ось симметрии второго порядка;

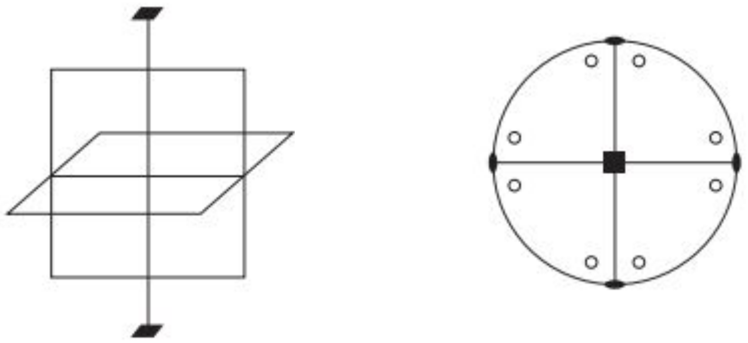
б) ось симметрии третьего порядка?





Задача 2

В кристалле имеется одна ось четвертого порядка и плоскости симметрии, перпендикулярные и параллельные этой оси (рис. 2.18, *а*).
Определите весь набор элементов симметрии, систему и класс симметрии.
Покажите эти элементы симметрии на стереографической проекции.

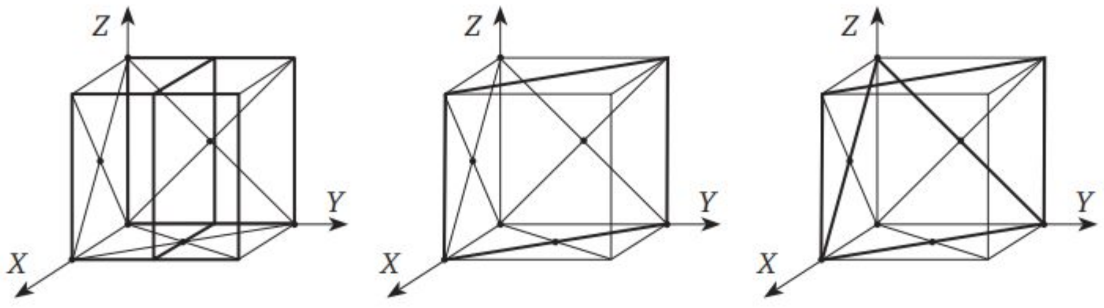


Задача 3

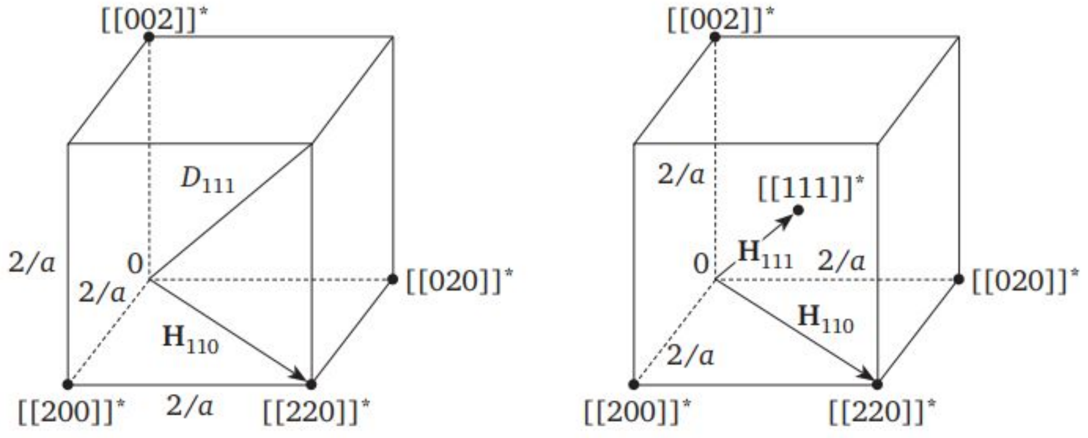
Даны две плоскости зеркального отражения, параллельные друг другу и расположенные на расстоянии *a*. Какая симметрическая операция получится в результате взаимодействия этих двух плоскостей?

Задача на самостоятельное решение

Известно, что у кристалла прямая решетка — гранецентрированная кубическая решетка.
Определить тип обраной решетки Браве.



а *б* *в*



Задачи 4-6.Дифракция

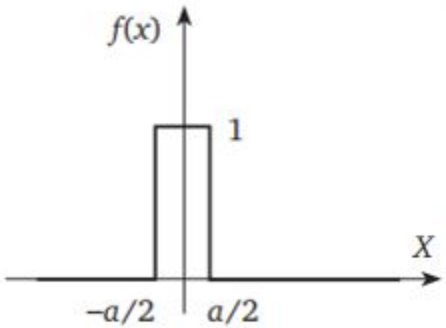
Дифракционная картина – Фурье-образ объекта, на котором происходит дифракция. Для решения задач дифракции
Необходимо математически описать объект, на котором происходит дифракция, в виде функции f(x),
и вычислить интеграл Фурье для этой функции.

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

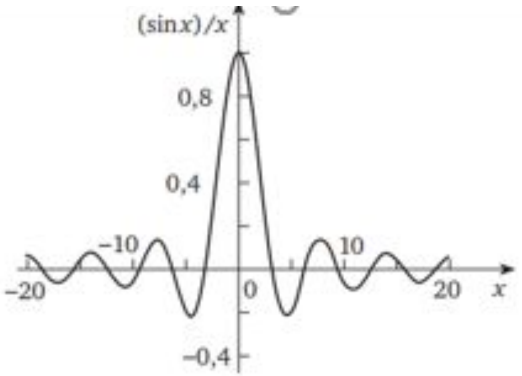
Задача 4.Дифракция

Плоская волна падает на узкую щель шириной *a*. Вычислить дифракционную картину (распределение интенсивности) на экране за щелью.

$$\mathbb{F}\{f(x)\} = F(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\cdot e^{2\pi i u x}\,dx.$$



$\mathbb{F}\{f(x)\}$



Формулы Эйлера

$$\exp(\pm ix) = \cos x \pm i \sin x$$

$$\sin x = \frac{\exp(ix) - \exp(-ix)}{2i}$$

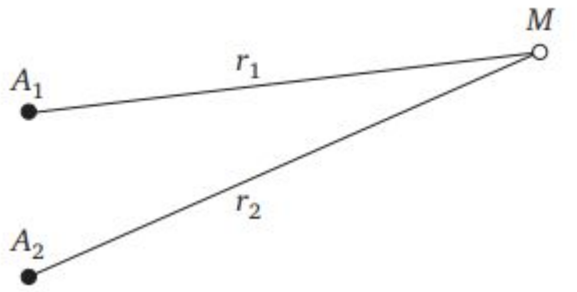
$$\cos x = \frac{\exp(ix) + \exp(-ix)}{2}$$

Табличный интеграл

$$\int e^{ax}dx = \frac{1}{a}e^{ax}.$$

Задача 5.Дифракция

Определить результат интерференции двух сферических когерентных волн в точке *M*, источники которых расположены в точках A_1 и A_2.



Сферическая волна:

$$E_1 = \frac{E_{01}}{r_1}\sin(\omega t - kr_1),$$

$$E_2 = \frac{E_{02}}{r_2}\sin(\omega t - kr_2).$$

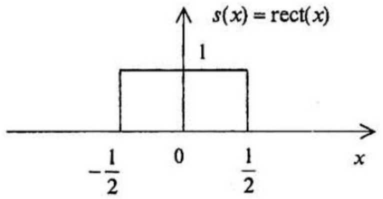
Амплитуда двух когерентных волн в точке?

Разность фаз в точке М:

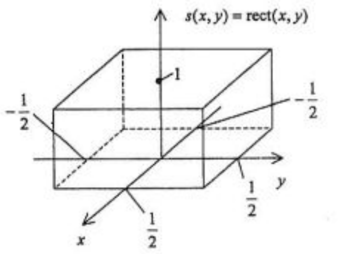
$$\varphi = \varphi_2 - \varphi_1 = -k(r_2 - r_1).$$

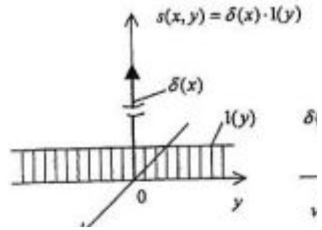
Примеры Фурье образов различных объектов

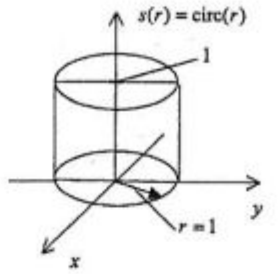
$$s(x) = \mathrm{rect}(x) = \begin{cases} 1 & x \le \frac{1}{2}; \\ 0 & |x| > \frac{1}{2}. \end{cases}$$



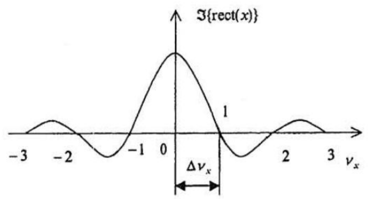
$$s(x, y) = \mathrm{rect}(x, y) = \begin{cases} 1, & |x| \le \frac{1}{2}, |y| \le \frac{1}{2}; \\ 0, & |x| > \frac{1}{2}, y - \text{любое}; \\ 0, & |y| > \frac{1}{2}, x - \text{любое}. \end{cases}$$

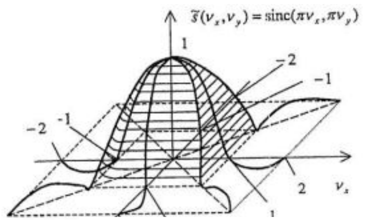


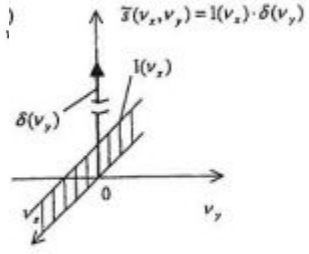


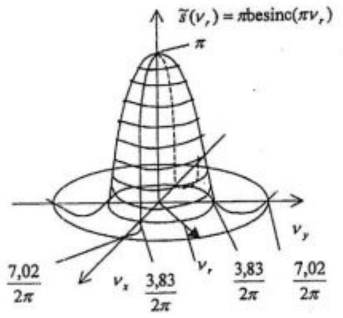


$\mathbb{F}\{f(x)\}$









Примеры Фурье образов различных объектов

Гребенчатая функция. Периодическая функция, состоящая из равноотстоящих δ-функций, обозначается comb(x):

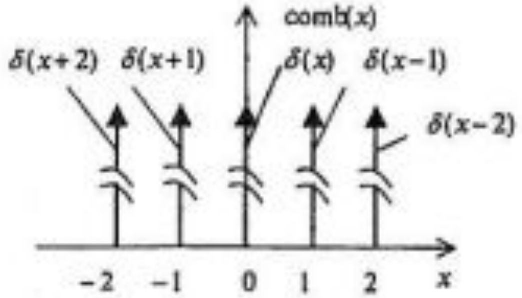
$$s(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(x - \kappa) = \mathrm{comb}(x),$$

где $\kappa = 0, \pm 1, \pm \ldots$.

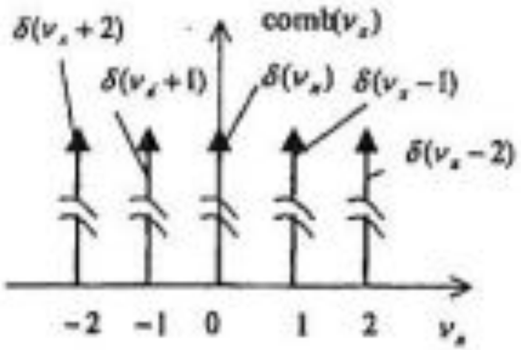
Функция comb(x), показанная на рис. 29, *а*, записывается в виде

$$\mathrm{comb}(x) = \sum_{\kappa=-\infty}^{\infty} \delta(x - \kappa) = \sum_{\kappa=-\infty}^{\infty} C_\kappa \exp(i2\pi\kappa x) = \sum_{\kappa=-\infty}^{\infty} 1 \cdot \exp(i2\kappa x),$$

где $C_\kappa = 1$.

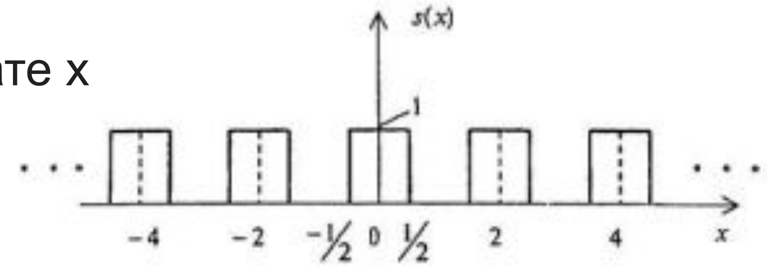


$$\Im\{\mathrm{comb}(x)\} = \mathrm{comb}(\nu_x),$$

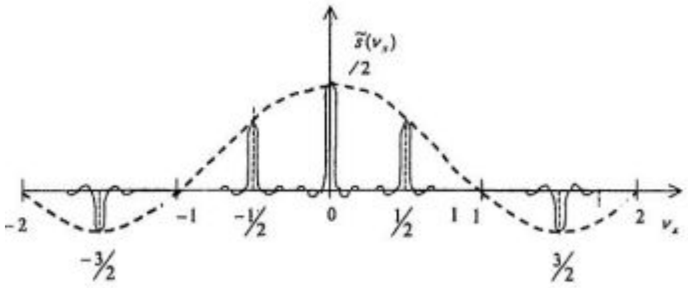


Периодическая последовательность rect(x) сигналов,
ограниченная по координате x

$$s(x) = \left[\mathrm{rect}(x) \otimes \frac{1}{2}\mathrm{comb}\left(\frac{x}{2}\right)\right]\mathrm{rect}\left(\frac{x}{9}\right).$$



$\mathbb{F}\{f(x)\}$



$$\tilde{s}(\nu_x) = 9\mathrm{sinc}(\pi\nu_x) \sum_{\kappa=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{sinc}[9\pi(\nu_x - \nu'_x)]\,\delta\left(\nu'_x - \frac{\kappa}{2}\right) d\nu_x =$$

$$= \frac{9}{2}\mathrm{sinc}(\pi\nu_x) \sum_{\kappa-\infty}^{\infty} \mathrm{sinc}\left[9\pi\left(\nu_x - \frac{\kappa}{2}\right)\right].$$

Задача 6.Дифракция

Рассчитать результат дифракции плоской волны на бесконечной дифракционной решетке.

Считать щель как дельта-функцию (бесконечно большая амплитуда и бесконечно малая толщина)

Изменение индекса суммирования:

$$\sum_{n=-N}^{+N} \exp(nx) = \exp(-Nx)\sum_{0}^{2N} \exp(nx).$$

Подсказка: Найти в выражении геометрическую прогрессию, сумма которой определяется, как:

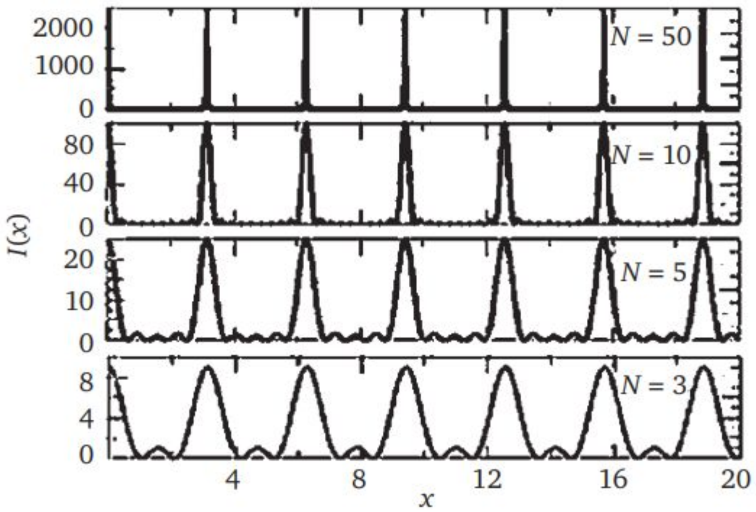
$$S_n = \frac{a_1(q^n - 1)}{q - 1}.$$

Итоговый результат – известная функция Лауэ для дифракции на одномерной решетке

Задача 5.Дифракция

Итоговый результат – известная функция Лауэ для дифракции на одномерной решетке:

$$I_{\Sigma}^{M} = \left(\frac{\mathrm{E}}{\mathrm{R}}\right)^2 \prod_{a,b,c}^{3} \frac{\sin^2(N\Psi_{a,b,c})}{\sin^2(\Psi_{a,b,c})}.$$



Положения максимумов:

$$\Psi_a = \frac{\pi}{\lambda}[(\mathbf{s}-\mathbf{s}_0), \mathbf{a}] = \pi h;$$

$$\Psi_b = \frac{\pi}{\lambda}[(\mathbf{s}-\mathbf{s}_0), \mathbf{b}] = \pi k;$$

$$\Psi_c = \frac{\pi}{\lambda}[(\mathbf{s}-\mathbf{s}_0), \mathbf{c}] = \pi l.$$

$$I_{\max} = \left(\frac{E}{R}\right)^2 (N^3)^2.$$

С увеличением количества щелей (Рассеивающих центров) дифракционные рефлексы сужаются, амплитуда их возрастает, величина побочных максимумов уменьшается.

Таким образом, функция Лауэ (или уравнение Вульфа — Брэгга) определяют геометрию дифракционной картины, т. е. определяют положения каждого дифракционного рефлекса на дифракционной картине.