RNDr. Jan Prokleška, Ph.D.
prokles@mag.mff.cuni.cz
(95155) 2772
`kfes.troja.mff.cuni.cz/fyzikaIV`

cvičení FIV 10.3.2022

4.1a *Ewaldova konstrukce.*
Srovnejte Ewaldovu konstrukci pro monochromatickou a polychromatickou neutronovou difrakci ($\lambda \sim 10^{-10}$ m) a elektronovou difrakci ($\lambda \sim 10^{-12}$ m). Rozvažte, načrtněte a (kvalitativně) diskutujte důsledky/použití.

Konstrukce viz pdf poznámky k cvičení.

Při elektronové difrakci prochází povrchem koule díky jejímu většímu poloměru více mřížových bodů, tj. je schopna zobrazit část roviny reciproké mříže i při nepohyblivém krystalu — lze použít k projekci roviny reciproké mříže a tedy k určení symetrie krystalu.

4.1b *Pomocí Ewaldovy kontrukce ukažte, že při použití polychromatického neutronového záření v Laueho diffrakci není možné rozlišit reflexe (100) a (200).*
(Platí obecně, tj. není možné od sebe odlišit reflexe $m\vec{h}$ a $n\vec{h}$.)

V případě polychromatického záření jsme schopni pozorovat reflexe, které jsou uzavřeny v 'mezikulí' tvořenými nejmenší a největší vlnovou délkou. Krystal je ve středu těchto kulových ploch, tj. difraktující paprsek je přímka procházející počátkem a tedy body reciprokého prostoru $m\vec{h}$ a $n\vec{h}$ ležící na stejné přímce přispívají do jedné reflexe a nejsou rozlišitelné.

4.2 *Dokažte, ze reciproká mříž ke kubické mříži je opět kubická mříž.*

Definice reciproké mříže:

$$\vec{b}_i = 2\pi \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{\vec{a}_i \cdot (\vec{a}_j \times \vec{a}_k)}$$

v čitateli je objem (skalár), ve jmenovateli vektorovy součin pravoúhlého systému vektorů, tj. výsledkem je opět pravoúhlý systém. Velikosti výsledných vektorů jsou stejné a to $\frac{2\pi}{a}$, tzn. popisují kubický systém.

4.3 *Určete vzdálenosti mezi rovinami (200), (220) a (202) pro kubickou a tetragonální mříž.*

Použijeme buď obecný vztah $d(hkl) = \frac{2\pi}{\|\vec{G}\|}$, kde $\vec{G}$ je vektor reciprokého prostoru určující danou rovinu, či v případech pravoúhlých mříží vztah

$$d(hkl) = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

pro $a = b = c$ dostaneme $d(hkl) = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

4.4 *Ukažte ekvivalenci Braggova zákona a Laueho difrakčních podmínek.*

Další možný přístup — Braggův zákon (zápis difrakce v reálném prostoru):

$$2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda$$

Laueho podmínky (zápis difrakce v reciprokém prostoru):

$$\begin{aligned}\vec{q}\cdot\vec{a}_1 &= 2\pi h\\ \vec{q}\cdot\vec{a}_2 &= 2\pi k\\ \vec{q}\cdot\vec{a}_3 &= 2\pi l\end{aligned}$$

kde $\vec{a}_i$ jsou primitivní vektory mřížky a $\vec{q} = 2\pi\frac{\vec{s}-\vec{s}_0}{\lambda}$ je difrakční vektor. Sečtením dostáváme $\vec{q}(\vec{a}_1+\vec{a}_2+\vec{a}_3) = 2\pi(h+k+l)$. Aby $\vec{q}$ vyhovovalo temto rovnicím, tak to musí být vektor reciproké mříže, tj. $\vec{q} = \vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ a tedy $\vec{G} = 2\pi\frac{\vec{s}-\vec{s}_0}{\lambda}$. Vynásobením λ a umocněním rovnice na druhou získáme

$$\begin{aligned}4\pi^2 s_0^2 + 4\pi\lambda\vec{G}\cdot\vec{s}_0 + \lambda^2 G^2 &= 4\pi^2 s^2\\ 4\pi\lambda\vec{G}\cdot\vec{s}_0 &= \lambda^2 G^2\end{aligned}$$

kde jsme využili toho že $\vec{s}$ i $\vec{s}_0$ jsou jednotkové vektory a faktu že pokud je řešením $\vec{G}$ je jím i $-\vec{G}$. Dále víme, že $d(hkl) = \frac{2\pi}{\|\vec{G}\|}$ a tedy máme

$$2\sin\theta = \frac{\lambda}{d}$$

Uvážime-li, že na indexy hkl nebyly kladeny žádné podmínky, tj. mohou mít společného dělitele, tak dostaneme Braggovu rovnici.