Sipanje na kubični mreži II

Anže Cigoj

april 2013

Naloga:
Železo kristalizira v ploskovno centrirani kubični mreži z mrežno konstanto 3.64 Å. Na monokristal železa posvetimo v smeri telesne diagonale konvencionalne (kubične) osnovne celice z belo rentgensko svetlobo z valovnimi dolžinami med 2 Å in 7 Å. Pod katerimi sipalnimi koti se širijo žarki sipane svetlobe? Kolikšna je valovna dolžina svetlobe v vsakem od teh žarkov?
(1. kolokvij FTS, 5. april 2013, naloga 1)

Rešitev:
Za bazo vektorjev realne mreže ($\vec{a}_i$) izberemo paroma pravokotne stranice konvencionalne osnovne celice (kocke s stranico a), bazo atomov znotraj konvencionalne osnovne celice sestavljajo atom v izhodišču in atomi v središču treh stikajočih se ploskev kocke. Vektorje njihovih pozicij označimo z $\vec{d}_i$. Bazo vektorjev recipročne mreže ($\vec{b}_i$) dobimo iz enačb:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \qquad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \qquad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

Zapišemo lahko:

$$\begin{aligned}
&\vec{a}_1 = a\hat{x} \qquad && \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x} \qquad && \vec{d}_1 = 0 \\
&\vec{a}_2 = a\hat{y} && \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{y} && \vec{d}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}) \\
&\vec{a}_3 = a\hat{z} && \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{z} && \vec{d}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z}) \\
& && && \vec{d}_4 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z})
\end{aligned}$$

Splošni vektor v recipročni mreži zapišemo kot: $\vec{K} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3$ kjer so $m_i \in \mathbb{Z}$

Izračunamo geometrijski faktor, pri čemer uporabimo zvezo $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$

$$S = \sum_j \exp(i\vec{K}\cdot\vec{d}_j) = 1 + \exp(i\pi(m_1+m_2)) + \exp(i\pi(m_1+m_3)) + \exp(i\pi(m_2+m_3))$$

$$= 1 + (-1)^{m_1+m_2} + (-1)^{m_1+m_3} + (-1)^{m_2+m_3} = \begin{cases} 4, \text{ če so } m_i \text{ vsi SODI ali vsi LIHI} \\ 0, \text{ sicer} \end{cases}$$

Sipani žarki se bodo torej pojavili samo v primeru, ko bodo m-ji ali vsi sodi ali pa vsi lihi. Vsota dveh celih števil je namreč soda le takrat, ko sta obe števili ali sodi ali lihi.

Valovno dolžino sipanih žarkov dobimo iz *von Laue*-ovega pogoja, ki ga zapišemo v obliki (enačbo (6.9) iz *Ashcroft Mermin*-a smo zaradi prikladnosti pomnožili s K):

$$\vec{k} \cdot \vec{K} = \frac{1}{2} K^2$$

$\vec{k}$ je valovni vektor vpadnega valovanja, ki je v našem primeru vzporeden s telesno diagonalo konvencionalne celice. Z baznimi vektorji realne mreže se to zapiše kot:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \hat{n} = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{1}{a\sqrt{3}} (\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3)$$

Vstavimo v enačbo in izrazimo valovno dolžino:

$$\frac{2\pi}{\lambda} \frac{1}{a\sqrt{3}} (\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3) \cdot (m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3) = \frac{1}{2} (m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3)^2$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} \frac{1}{a\sqrt{3}} 2\pi(m_1 + m_2 + m_3) = \frac{1}{2} \frac{4\pi^2}{a^2} (m_1^2 + m_2^2 + m_3^2)$$

$$\lambda = \frac{2a}{\sqrt{3}} \frac{(m_1 + m_2 + m_3)}{(m_1^2 + m_2^2 + m_3^2)}$$

Za m-je še vedno veljajo gornje omejitve. Dodaten pogoj iz besedila naloge je, da je valovna dolžina med 2 in 7 Å.

Kót sipanega žarka izrazimo iz enačbe:

$$K = 2k \sin\left(\frac{1}{2}\theta\right) \quad \Rightarrow \quad \theta = 2\arcsin\left(\frac{K}{2k}\right)$$

$$\theta = 2\arcsin\left(\frac{\lambda}{2a}\sqrt{m_1^2 + m_2^2 + m_3^2}\right)$$

Da ostanemo znotraj definicijskega območja mora biti argument manjši ali enak 1. Valovna dolžina mora torej biti:

$$\lambda \leq \frac{2a}{\sqrt{m_1^2 + m_2^2 + m_3^2}} = \lambda_{\max}$$

Rezultate zapišimo v tabeli, pri čemer se držimo vseh ugotovljenih pogojev: m_i so lahko ali vsi sodi ali vsi lihi in valovna dolžina leži na intervalu $[2, \lambda_{\max}]$.

m_1	m_2	m_3	λ [Å]	λ_{max} [Å]	kót (°)
2	0	0	2,10	3,64	70,53
1	1	1	4,20	4,20	180,00
2	2	0	2,10	2,57	109,47
2	2	2	2,10	2,10	180,00
3	1	1	1,91	/	/
3	3	1	1,55	/	/

Dobimo torej štiri različne žarke sipane svetlobe, ki se sipajo pod tremi različnimi koti (70,5; 109,5 in 180 stopinj) in imajo dve različni valovni dolžini (2,1 in 4,2 Å).