Sipanje na kvadratni mreži

Andrej Leban

Opis naloge

Na nevtralnem substratu nastane sloj ionskega kristala, ki tvori kvadratno mrežo z medatomsko razdaljo 1 Å. Vzporedno s površino, v smeri ene od stranic kvadratne mreže vpada nemonokromatski snop rentgenskih žarkov z energijami med 4 keV in 9 keV.

Določi vse kote, pri katerih dobimo Braggove odboje. Izračunaj energije sipanih rentgenskih žarkov

Opraviti imamo s 2-dimenzionalno kvadratno mrežo. Bazna vektorja sta:

$$\overrightarrow{a_1} = a(1,0) \tag{1}$$

$$\overrightarrow{a_2} = a(0,1) \tag{2}$$

, kjer je a medatomska razdalja. Recipročna mreža kvadratne mreže je spet kvadratna mreža:

$$\overrightarrow{b_1} = \frac{2\pi}{a}(1,0) \tag{3}$$

$$\overrightarrow{b_2} = \frac{2\pi}{a}(0,1) \tag{4}$$

Vpadna svetloba ima energije od 4 keV do 9 keV kar ustreza:

$$|k_1| \approx 0.32|b_{1ali2}| \longleftrightarrow 0.73|b_{1ali2}| \approx |k_2| \tag{5}$$

Nalogo najprej vizualno predstavimo s pomočjo Ewaldove sfere (v tem primeru kroga):

Vpadni vektor $\overrightarrow{k}$ ima **dano smer** in je enak:

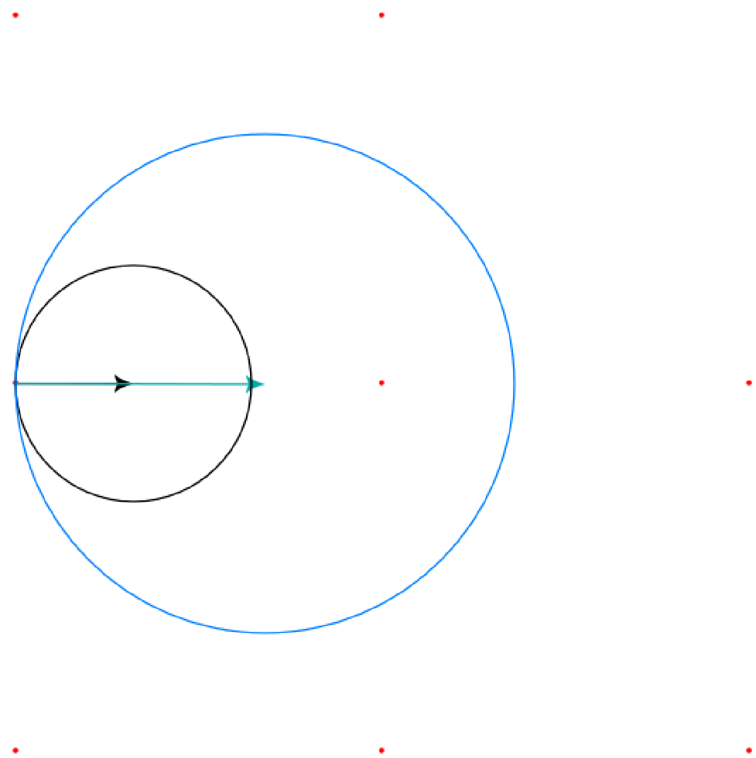
$$\overrightarrow{k} = \frac{2\pi}{\lambda}(1,0) \tag{6}$$

, kjer λ leži med $1.37a$ in $3.09a$. Sipani vektor $\overrightarrow{k'}$ označimo kot:

$$\overrightarrow{k'} = \frac{2\pi}{\lambda'}(m_1, m_2) \tag{7}$$

m1, m2 sta v tem primeru **realni števili**. λ' ni realna valovna dolžina, le faktor skaliranja, ker ima $\overrightarrow{k'}$ poljubno smer v prostoru (da ohranimo podoben zapis $\overrightarrow{k}$).

Ewaldova konstrukcija:



Slika 1: Ewaldova konstrukcija, vpadni $\overrightarrow{k}$ teče od črne do turkizne puščice. Mogoči Braggovi odboji so vse točke recipročne mreže med črnim in modrim krogom - t.j. le $\frac{2\pi}{a}(1,0)$

Iz skice, (ki je narisana okvirno), razberemo, da pričakujemo le en Braggov odboj - ko bo razlika vpadnega in odbitega valovnega vektorja enaka $\overrightarrow{b_1}$. Sedaj to pokažemo še analitično:

Ker imamo opravka z Braggovim sipanjem, velja

$$|\overrightarrow{k}| = |\overrightarrow{k'}| \tag{8}$$

To nam poda λ' odbitega vektorja:

$$\lambda' = \lambda\sqrt{m_1^2 + m_2^2} \tag{9}$$

Von Lauejeva formulacija zahteva, da je razlika med odbitim in vpadnim valovnim vektorjem vektor recipročne mreže:

$$\overrightarrow{k'} - \overrightarrow{k} = \overrightarrow{K} \tag{10}$$

Vektorje recipročne mreže označimo kot:

$$\overrightarrow{K} = \frac{2\pi}{a}(K_1, K_2) \tag{11}$$

K_1, K_2 sta **celi števili**.
Sedaj lahko razpišemo Von Lauejev pogoj po komponentah:

$$\frac{2\pi m_1}{\lambda\sqrt{m_1^2+m_2^2}} - \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi}{a}K_1 \qquad \text{(x smer)}$$

$$\frac{2\pi m_2}{\lambda\sqrt{m_1^2+m_2^2}} = \frac{2\pi}{a}K_2 \qquad \text{(y smer)}$$

Enačba za y se predela v:

$$\frac{\lambda}{a}K_2 = \frac{m_2}{\sqrt{m_1^2+m_2^2}} \tag{12}$$

Poudariti je potrebno, da $\frac{\lambda}{a}$ teče od približno 1.37 do približno 3.09. Desna stran je za netrivialne m_2 lahko največ 1.

Torej imamo v y smeri le trivialno rešitev: $m_2 = 0, K_2 = 0$

Če to prenesemo v enačbo za x, dobimo:

$$\frac{m_1}{\sqrt{m_1^2}} - 1 = \frac{\lambda}{a}K_1 \tag{13}$$

Leva stran je lahko 0 ali -2. Desna stran je torej -2, z $K_1 = -1$ in $\frac{\lambda}{a} = 2$.

Torej je edini netrivialni odboj naslednji: $\overrightarrow{k'} = \frac{\pi}{a}(-1,0)$. Na skici bi to pomenilo da sta tako vpadni kot odbiti valovni vektor natanko polovica $\overrightarrow{b_1}$.

Ta odbiti vektor je seveda za π obrnjen od vpadnega oziroma povedano z Braggovim kotom: $\theta = 90°$

$|k'| = \frac{\pi}{a}$ nam da energijo sipanega žarka $E = 6.199keV$

Oceni vezavno energijo kristala na enoto površine na osnovi Coulombskih interakcij. Predpostavi, da so ioni v kristalu enkrat ionizirani.

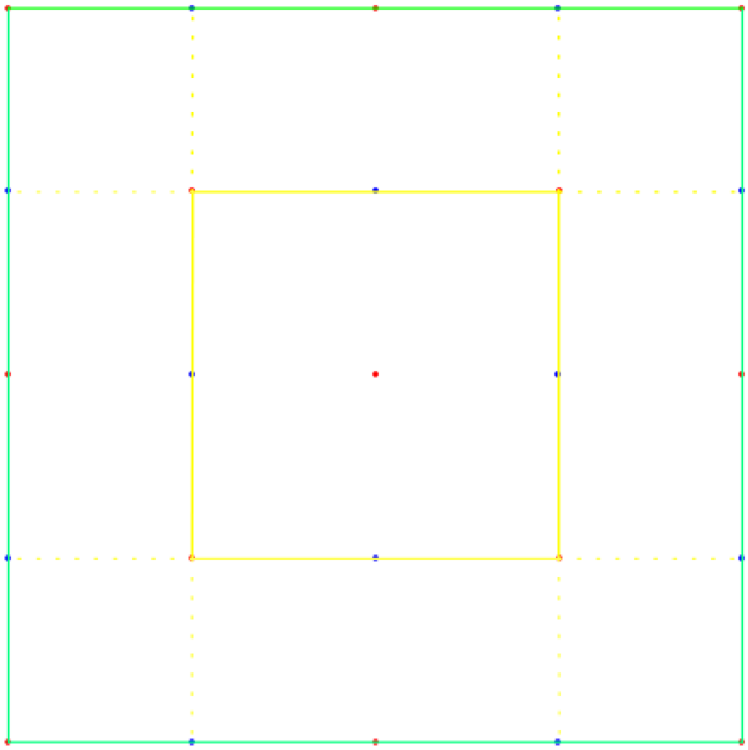
Coulombska energija na **ionski par** je podana kot:

$$u_{pair}^{coul}(a) = -\alpha \cdot \frac{Z_1 Z_2 e_0^2}{4\pi\epsilon_0 a} \tag{14}$$

kjer je a medionska razdalja - torej 1 $\mathring{A}$. α je t.i. *Madelungova konstanta*, ki nam poda informacijo o strukturi ionske mreže:

$$\alpha = \sum_{R!=i} \frac{Z_j}{R_{ij}/a} \tag{15}$$

Madelungovo konstanto sem se odločil izračunati s seštevanjem po nevtralnih celicah. Ker sedaj ločimo ione - v kvadratni 2D mreži so 4 najbližji sosedi nasprotnega naboja, sem prešel na mrežo z bazo. Razdalja do naslednjega enakega iona je torej **2a**. Na spodnji skici je z rumeno označena prva nevtralna celica, ki je hkrati tudi naša osnovna celica za mrežo z bazo. Druga nevtralna celica je obrobljena z zeleno:



Slika 2: Kvadratna ionska mreža, rdeči so pozitivni, modri pa negativni ioni ali obratno. Z rumeno so označene meje osnovnih celic, centralna je hkrati tudi prva nevtralna celica.

Seštevanje po prvi nevtralni celici nam da:

$$\alpha_1 = \sum_{R \in 1.n.c} \frac{Z_j}{R_{ij}/a} = 4\frac{-1/2}{1/2} + 4\frac{+1/4}{\sqrt{2}/2} \approx -2.58579 \tag{16}$$

Predznak je irelevnaten, za računanje se vzame $|\alpha|$, saj mora biti vezavna energija na par invariantna na izbiro izhodišča v anionu ali kationu. Negativne naboje se šteje polovično, saj si jih delita dve osnovni celici, pozitivne pa kot 1/4, saj so hkrati v štirih osnovnih celicah.

Za natančnejšo oceno seštejemo še po drugi (vključno s celotno prvo) nevtralni plasti:

$$\alpha_{1+2} = \sum_{R \in 2.n.c} \frac{Z_j}{R_{ij}/a} = 4\frac{-1}{1/2} + 4\frac{+1}{\sqrt{2}/2} + 4\frac{+1/2}{1} + 8\frac{-1/2}{\sqrt{5}/2} + 8\frac{+1/4}{\sqrt{8}/2} \approx -3.21375 \tag{17}$$

Če seštejemo le števce ulomkov, vidimo, da je celica res nevtralna.

$|\alpha_2| = |\alpha_{1+2}| - |\alpha_1| \approx 0.63 < |\alpha_1|$, členi v vrsti se torej zmanjšujejo, tako da bo za okvirno oceno konstanta legitimna.

Ker so ioni enkrat ionizirani, sta Z_1 in Z_2 enaka 1.

$$u_{pair}^{coul}(a) = -|\alpha| \cdot \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 a} \approx -45.45eV \tag{18}$$

Energija na površino je torej:

$$e_c oul = \frac{u_{iona}}{A_{osnovnecelice}} = \frac{1/2 u_{pair}^{coul}}{a^2} \approx 370 \frac{J}{m^2} \tag{19}$$