Baker-oksidne plasti

Rok Hribar

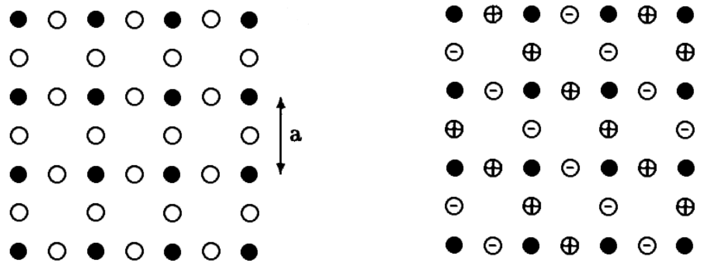
22.6.2012

Kazalo

1 Naloga

a) Skiciraj Bravaisovo mrežo za Baker-oksidne plasti in zapiši primitivne vektorje. Kakšna je možna osnovna celica in baza? Predpostavi, da so medsebojene plasti razmaknjene za razdaljo c.

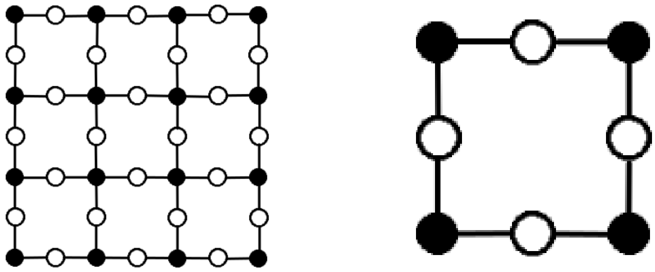
b) V sorodnem kristalu $LaCuO_4$ so kisikovi atomi zamaknjeni gor in dol za majhno razdaljo d. Kakšna je v tem primeru možna osnovna celica in baza ter kolikšna je tedaj medmrežna razdalja? Zapiši recipročno mrežo in primerjaj z recipročno mrežo v primeru a. Kvalitativno opiši kaj se zgodi pri difrakciji žarkov X, ko distorcija limitira proti nič.



Slika 1: Razporeditev atomov v baker-oksidni plasti (levo) ter v primeru distorcije (desno).

2 Baker-oksidne plasti

Možna Bravaisova mreža in osnovna celica je hitro prepoznavna iz slike (1).



Slika 2: Primer možne Bravaisove mreže (levo) ter osnovne celice (desno).

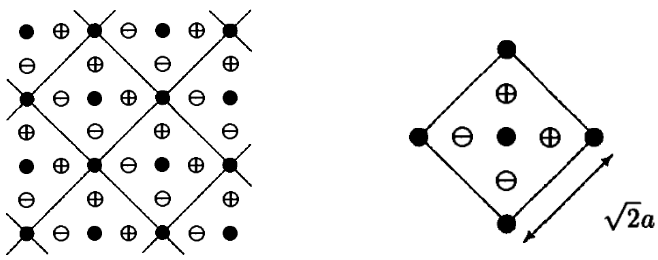
Zapišimo primitivne vektorje **a** in bazo **b** za to Bravaisovo mrežo v vektorski obliki.

$$\mathbf{a_1} = (a, 0, 0) \tag{1}$$
$$\mathbf{a_2} = (0, a, 0) \tag{2}$$
$$\mathbf{a_3} = (0, 0, c) \tag{3}$$

$$\mathbf{b^{Cu}} = (0, 0, 0) \tag{4}$$
$$\mathbf{b_1^O} = (a/2, 0, 0) \tag{5}$$
$$\mathbf{b_2^O} = (0, -a/2, 0) \tag{6}$$

3 Baker-oksidne plasti z distorcijo

V primeru distorcije si moramo izbrati drugačno Bravaisova mreža z večjo osnovno celico.



Slika 3: Primer možne Bravaisove mreže (levo) ter osnovne celice (desno).

Zapišimo primitivne vektorje **a** in bazo **b** za to Bravaisovo mrežo v vektorski obliki.

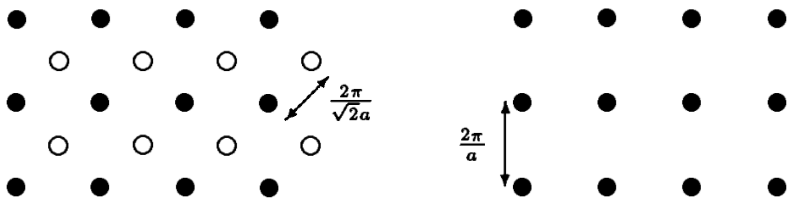
$$\mathbf{a_1} = (a, a, 0) \tag{7}$$
$$\mathbf{a_2} = (a, -a, 0) \tag{8}$$
$$\mathbf{a_3} = (0, 0, c) \tag{9}$$

$$\mathbf{b_1^{Cu}} = (0, 0, 0) \tag{10}$$
$$\mathbf{b_2^{Cu}} = (a, 0, 0) \tag{11}$$
$$\mathbf{b_1^{O}} = (a/2, 0, d) \tag{12}$$
$$\mathbf{b_2^{O}} = (a, -a/2, d) \tag{13}$$
$$\mathbf{b_3^{O}} = (3a/2, 0, -d) \tag{14}$$
$$\mathbf{b_4^{O}} = (a, a/2, -d) \tag{15}$$

Omembe vredno dejstvo je, da ima Bravaisova mreža iz naloge b) za faktor $\sqrt{2}$ daljšo medmrežno razdaljo, kar vpliva na sipanje žarkov X. Poglejmo recipročni mreži in primerjajmo oba primera. V primeru a) imamo že znano recipročno mrežo primitivne tetragonalne mreže. V primeru b) pa

$$\mathbf{k_1} = 2\pi \frac{\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3}}{\mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3})} = -\frac{\pi}{a}(1, 1, 0) \tag{16}$$
$$\mathbf{k_2} = 2\pi \frac{\mathbf{a_3} \times \mathbf{a_1}}{\mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3})} = -\frac{\pi}{a}(1, -1, 0) \tag{17}$$
$$\mathbf{k_3} = 2\pi \frac{\mathbf{a_1} \times \mathbf{a_2}}{\mathbf{a_1} \cdot (\mathbf{a_2} \times \mathbf{a_3})} = -\frac{2\pi}{c}(0, 0, 1). \tag{18}$$

Kar bi lahko ugotovili tudi brez računa, saj imamo v primeru b) prav tako primitivno tetragonalno mrežo, vendar z, za faktor $\sqrt{2}$, večjo medmrežno razdaljo ter zarotirano za $\pi/4$. Recipročna mreža primera b) je torej kot prej tetragonalna mreža, vendar gostejša (medmrežna razdalja bo za faktor $\sqrt{2}$ manjša) in zarotirana za $\pi/4$, saj je operacija vektorskega produkta invariantna na delovanje rotacijske grupe in vrednost mešanega produkta se pod njenim delovanjem ohrani.



Slika 4: Recipročna mreža brez distorcije (desno) ter z distorcijo, kjer so z belo označene točke, ki izginejo, ko gre distorcija proti nič.

Sipanje žarkov X na kristalu iz primera b) mora biti v limiti ko gre distorcija d proti nič, enako sipanju na kristalu iz primera a). Za to mora poskerbeti strukturni faktor, ki mora postati nič, za tiste elemente recipročne mreže, ki so na zgornji sliki označeni z belo. Tako na belih točkah z recipročne mreže nimamo konstruktivne interference, ampak popolnoma destruktivno in sipanje na obeh mrežah iz slike postane ekvivalentno.