Strukturni faktor za FCC strukturo z bazo

Štefan Krek

25. junij 2008

1 Naloga

(Ashcroft, 5. naloga v 6. poglavju.)
a) Določi strukturni faktor za NaCl.
b) Določi strukturni faktor za cinkovo svetlico.
c) V primeru, če imamo sferično simetrične ione, potem je atomski faktor $f_{\pm}(\vec{K})$ odvisen samo od velikosti recipročnega vektorja $\vec{K}$. Razišči kako lahko iz strukturnega faktorja v povezavi z Braggovimi vrhovi ločimo kristalni strukturi natrijevega klorida in cinkove svetlice.

2 Rešitev

a) Strukturo natrijevega klorida lahko opišemo s fcc Bravaisovo mrežo in bazo.

$$\vec{r}_+ = (0,0,0) \qquad \text{mesto pozitivnega iona (Na}^+\text{)}$$

$$\vec{r}_- = \frac{a}{2}(1,0,0) \qquad \text{mesto negativnega iona (Cl}^-\text{)}$$

Recipročna mreža ploskovno centrirane mreže je telesno centrirana mreža z recipročnimi baznimi vektorji

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-1,1,1), \qquad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(1,-1,1), \qquad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(1,1,-1).$$

Recipročni vektor ima obliko:

$$\vec{K} = n_1\vec{b}_1 + n_2\vec{b}_2 + n_3\vec{b}_3$$

Oziroma za naš primer

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{a}(-n_1+n_2+n_3, n_1-n_2+n_3, n_1+n_2-n_3)$$

Če uvedemo nov zapis

$$\nu_j = \frac{1}{2}(n_1 + n_2 + n_3) - n_j, \qquad \sum_{j=1}^{3} \nu_j = \frac{1}{2}(n_1 + n_2 + n_3),$$

dobimo

$$\vec{K} = \frac{4\pi}{a}(\nu_1, \nu_2, \nu_3).$$

Strukturni faktor za kristal v katerem je več vrst gradnikov ima obliko:

$$S_{\vec{K}} = \sum_{j=1}^{n} f_j(\vec{K}) e^{\imath \vec{K} \cdot \vec{r}_j}, \tag{1}$$

kjer je $f_j(\vec{K})$ atomski faktor in je odvisen od porazdelitve naboja v atomu ter od recipročnega vektorja $\vec{K}$. V primeru NaCl imamo dve vrsti atomov. Atomski faktor za Na^+ označimo z f_+, atomski faktor za Cl^- pa f_-. Strukturni faktor za naš primer je

$$S_{\vec{K}} = f_+ + f_- e^{\imath \frac{4\pi}{a} \frac{a}{2} \nu_1} = f_+ + f_- e^{\imath 2\pi \nu_1}$$

$$S_{\vec{K}} = \begin{cases} f_+ + f_- & \text{za } \nu_1 \text{ je celo število,} \\ f_+ - f_- & \text{za } \nu_1 \text{ je celo število} + \frac{1}{2}. \end{cases}$$

Če je $S_{\vec{K}} = f_+ - f_-$, potem je v primeru, da je $f_+ = f_-$, strukturni faktor enak 0. To je zato, ker nimamo več ploskovno centrirane strukture z bazo $\vec{r}_-$, pač pa dobimo navadno kubicno mrežo z polkrajšo mrežno konstanto $(a/2)$. Zaradi tega tudi izginejo pripadajoči Braggovi vrhovi.

b) Cinkova svetlica ima tudi fcc strukturo z bazo.

$$\vec{r}_+ = (0, 0, 0) \qquad \text{mesto pozitivnega iona}$$

$$\vec{r}_- = \frac{a}{4}(1, 1, 1) \qquad \text{mesto negativnega iona}$$

za ta kristal rešujemo nalogo na enak način kot za NaCl. Recipročni vektor za fcc Bravaisovo mrežo je

$$\vec{K} = \frac{4\pi}{a}(\nu_1, \nu_2, \nu_3).$$

Strukturni faktor je torej

$$S_{\vec{K}} = f_+ + f_- e^{\imath \frac{4\pi}{a} \frac{a}{4}(\nu_1 + \nu_2 + \nu_3)} = f_+ + f_- e^{\imath \pi (\nu_1 + \nu_2 + \nu_3)}$$

$$S_{\vec{K}} = \begin{cases} f_+ \pm i f_- & \text{za } \nu_i \text{ so cela števila} + \frac{1}{2}, \\ f_+ + f_- & \text{za } \nu_i \text{ so cela števila in} \sum \nu_i \text{je sodo število,} \\ f_+ - f_- & \text{za } \nu_i \text{ so cela števila in} \sum \nu_i \text{je liho število.} \end{cases}$$

c) Poglejmo si sedaj, kako se razlikujejo strukturni faktorji natrijevega klorida in cinkove svetlice v odvisnosti od števil ν_i.

(ν_1, ν_2, ν_3)	Natrijev klorid	Cinkova svetlica
$\nu_i \in Z$, $\sum \nu_i =$Sodo število	$f_+ + f_-$	$f_+ + f_-$
$\nu_i \in Z$, $\sum \nu_i =$Liho število	$f_+ + f_-$	$f_+ - f_-$
$\nu_i \in Z + \frac{1}{2}$, $\sum \nu_i =$sodo število $+ \frac{1}{2}$	$f_+ - f_-$	$f_+ + if_-$
$\nu_i \in Z + \frac{1}{2}$, $\sum \nu_i =$liho število $+ \frac{1}{2}$	$f_+ - f_-$	$f_+ - if_-$

Kot je razvidno iz tabele, so nekateri strukturni faktorji enaki pri enakih recipročnih vektorjih za obe strukturi. Kar nam da pri Braggovem odboju enake vrhove. Nekateri strukturni faktorji pa so različni, kar pomeni, da so Braggovi vrhovi na različnih mestih. Torej se uklonski sliki razlikujeta, po nekaterih vrhovih.

Da določimo s pomočjo Braggovih vrhov za katero strukturo gre, upoštevamo dejstvo, da je $f(K)$ odvisen samo od velikosti recipročnega vektorja K.

$$|\vec{K}| = \frac{4\pi}{a}\sqrt{\nu_1^2 + \nu_2^2 + \nu_3^2}$$

Torej spreminjamo smer recipročnega vektorja, pri tem pa ohranjamo dolžino. Gledamo kateri vrhovi se pojavijo pri določeni vrednosti števil ν_i.