

Sipanje na praškastem vzorcu

Matjaž Ivančič

September, 2009

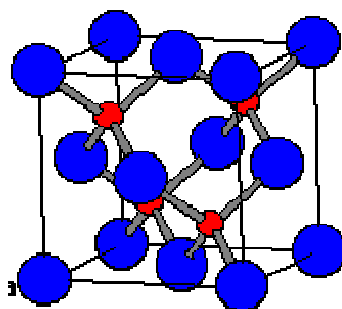
Naloga:

Praškast vzorec treh različnih enoatomnih kubičnih kristalov analiziramo z Debye-Sherrer kamero. Znano je, da en vzorec ima BCC, drugi FCC in tretji diamantno strukturo. Približni odklon prvih štirih žarkov je viden v tabeli 1.

A	B	C
42,2°	28,8°	42,8°
49,2°	41,0°	73,2°
72,0°	50,8°	89,0°
87,3°	59,6°	115,0°

Tabela 1) izmerjeni odkloni žarkov za tri neznane strukture.

- Določi kristalne strukture A, B in C.
- Določi dolžino stranice osnovne celice, če je valovna dolžina X-žarkov $\lambda = 1,5 \text{ \AA}$.
- Pod kakšnimi koti bi opazili prve štiri odklone, v kolikor bi diamantno strukturo zamenjali z »zincblende« strukturo (ZnS) (Slika 1) z osnovno celico enake velikosti?



Slika 1) Osnovna celica t.i. zincblende strukture oz. ZnS kristala. Struktura je podobna diamantni le, da namesto enega gradnika imamo v tem primeru dva, in sicer Zn (rdeče kroglice) ter S (modre kroglice).

Rešitev:

a) V nalogi obravnavamo tri strukture, in sicer BCC, FCC in diamantno (FCC + baza). BCC mreži pripada recipročna mreža FCC oblike, FCC mreži BCC recipročna mreža in diamantni pa BCC s posebnostmi.

Pri obravnavanju sipanja žarka na praškastem vzorcu uporabimo enačbo

$$K = 2k \sin\left(\frac{1}{2}\phi\right), \quad 1)$$

kjer je $k = 2\pi/\lambda$. Enačbo (1) lahko tako uporabimo na prvih štirih recipročnih vektorjih vsake strukture in tako pogledamo ujemanje kotov. V spodnji tabeli (Tabela 2) so navedene dolžine prvih štiri recipročnih vektorjev za vsako strukturo. Dolžine dobimo po sledeči enačbi

$$K = \frac{2\pi}{a} \sqrt{l^2 + m^2 + n^2}, \quad 2)$$

kjer je a dolžina celice kristala, l , m in n pa Millerjevi indeksi. Dovoljene indekse dobimo s pomočjo izračuna strukturnega faktorja (glej nalogo Strukturni faktor - kubične mreže od Marka Petriča leta 2007/08).

BCC	FCC	diamant
$\frac{2\pi}{a} \sqrt{2}$	$\frac{2\pi}{a} \sqrt{3}$	$\frac{2\pi}{a} \sqrt{3}$
$\frac{2\pi}{a} \sqrt{4}$	$\frac{2\pi}{a} \sqrt{4}$	$\frac{2\pi}{a} \sqrt{8}$
$\frac{2\pi}{a} \sqrt{6}$	$\frac{2\pi}{a} \sqrt{8}$	$\frac{2\pi}{a} \sqrt{11}$
$\frac{2\pi}{a} \sqrt{8}$	$\frac{2\pi}{a} \sqrt{11}$	$\frac{2\pi}{a} \sqrt{16}$

Tabela 2) Tabela dolžin prvih štirih recipročnih vektorjev posamezne strukture.

Ker je valovni vektor vpadne svetlobe ves čas enak, lahko enačbo za vsak prvi kot oz. recipročni vektor enačimo s preostalimi tremi. Tako dobimo niz enačb

BCC	FCC	diamant	
$\sin(1/2 \phi_2)$ $= \sqrt{2} \sin(1/2 \phi_1)$	$\sin(1/2 \phi_2)$ $= \sqrt{4/3} \sin(1/2 \phi_1)$	$\sin(1/2 \phi_2)$ $= \sqrt{8/3} \sin(1/2 \phi_1)$	
$\sin(1/2 \phi_3)$ $= \sqrt{3} \sin(1/2 \phi_1)$	$\sin(1/2 \phi_3)$ $= \sqrt{8/3} \sin(1/2 \phi_1)$	$\sin(1/2 \phi_3)$ $= \sqrt{11/3} \sin(1/2 \phi_1)$	3)
$\sin(1/2 \phi_4)$ $= \sqrt{4} \sin(1/2 \phi_1)$	$\sin(1/2 \phi_4)$ $= \sqrt{11/3} \sin(1/2 \phi_1)$	$\sin(1/2 \phi_4)$ $= \sqrt{16/3} \sin(1/2 \phi_1)$	

V kolikor uporabimo niz enačb (3) na vsak prvi kot iz tabele 1 dobimo:

	ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3	ϕ_4
BCC	28,8	41,2	51,0	59,7
BCC	42,2	61,2	77,1	92,1
BCC	42,8	62,1	78,4	93,7

FCC	28,8	33,4	47,9	56,9
FCC	42,2	49,1	71,0	87,2
FCC	42,8	49,8	73,1	88,6
diamant	28,8	47,9	56,9	70,1
diamant	42,2	72,	87,2	112,5
diamant	42,8	73,1	88,6	114,8

Tabela 3) Približne velikosti kotov sipane svetlobe dobljenih iz niza enačb (3) in prvih kotov tabele 1.

Iz tabele 3 lahko tako razberemo, da je struktura A FCC oblike, struktura B BCC in struktura C diamantna.

b) Dolžine stranic osnovnih celic določimo z enačbo (1), kjer uporabimo zvezo $k = 2\pi/\lambda$. Na podlagi že izračunanih dolžin prvih recipročnih vektorjev in njim prirejenimi koti dobimo, da je za strukturo A

$$a = \frac{\lambda}{2\sin(1/2 \phi_1)}\sqrt{2} = 4,3 \text{ \AA}, \quad 4)$$

za strukturo B

$$a = \frac{\lambda}{2\sin(1/2 \phi_1)}\sqrt{3} = 3,6 \text{ \AA}, \quad 5)$$

in za strukturo C

$$a = \frac{\lambda}{2\sin(1/2 \phi_1)}\sqrt{3} = 3,6 \text{ \AA}. \quad 6)$$

c) V kolikor diamantno strukturo zamenjamo z ZnS dobimo FCC strukturo z bazo. Razlika v gradnikih spremeni tudi struktorni faktor kristala (glej nalogo Strukturni faktor – mreže z bazo od Štefana Kreka leta 2007/08) in zaradi tega vrhovi (1, 1, 0), (2, 0, 0), (2, 2, 2)... ne izginejo več. Kote za to strukturo pri dani velikosti celice smo že izračunali v tabeli 3, in sicer 42.8, 49.8, 73.1 in 88.6. Pri izračunu smo tako upoštevali FCC strukturo in prvi kot, ki je enak kotu diamantne strukture.