

F7030 Rentgenová strukturní analýza – příklady do cvičení

Verze 14. prosince 2023

1 Příklady do cvičení	1
1.1 Experimentální technika – Exkurze	1
1.2 Rozptylový faktor vodíku-podobného 1s atomového orbitalu	1
1.3 Rozptylový faktor atomu	1
1.4 Rozptylový faktor fullerenu	2
1.5 Reciproké mříže	2
1.6 Strukturní faktory kubických mříží	2
1.7 Strukturní faktor SnTe	2
1.8 Difrakce polykrystalu	2
1.9 Difrakční úhly	2
1.10 Difrakční efekty spojené s konečnou velikostí krystalu	2
1.11 RTG difrakce na $\mathbf{A}_x\mathbf{C}_{60}$	3
1.12 Difrakce diamantu	3
1.13 Tvarová funkce částice	3
1.14 Intenzita v anti-Braggově poloze	3
1.15 Tenká pseudomorfní vrstva InAs na GaAs (001)	3
1.16 Odrazivost a polarizace	3
1.17 Odrazivost vrstvy	4
1.18 Simulace vrstev a multivrstev	4
1.19 Fitování vrstev a multivrstev	4
1.20 Dynamická teorie difrakce	4
1.21 Semikinematická teorie	4
1.22 Semikinematická teorie	4
1.23 Monochromátory různé difrakce	4
1.24 Monochromátory různé vlnové délky	4
1.25 Monochromátory různé krystaly	4

Ke stažení na www.physics.muni.cz/~caha/vyuka.html.

1 Příklady do cvičení

1.1 Experimentální technika – Exkurze

První cvičení je exkurze do laboratoře s ukázkami experimentální techniky: zdroje, goniometry, optické prvky, detektory.

1.2 Rozptylový faktor vodíku-podobného 1s atomového orbitalu

Vypočítejte rozptylový faktor vodíku-podobného 1s orbitalu s vlnovou funkcí

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a},$$

kde $a = \frac{a_0}{Z - z_s}$.

1.3 Rozptylový faktor atomu

Standardní aproximace rozptylového faktoru je

$$f(Q/4\pi) = \sum_{j=1}^4 a_j e^{-b_j \sin^2 \theta / \lambda^2} + c.$$

Proveďte transformaci do přímého prostoru. Které členy vyjadřují hluboké a které valenční elektrony pro měď?

	a_1	$b_1 (\text{Å}^2)$	a_2	$b_2 (\text{Å}^2)$	a_3	$b_3 (\text{Å}^2)$	a_4	$b_4 (\text{Å}^2)$	c
Cu	13.3380	3.5828	7.1676	0.2470	5.6158	11.3966	1.6735	64.8126	1.1910

Ověřte počet elektronů jako $f_0(0)$. Odhadněte poloměr koule, uvnitř které se nachází polovina elektronů. Porovnejte s atomovým poloměrem mědi 1.28 Å.

1.4 Rozptylový faktor fullerenu

Spočítejte rozptylový faktor fullerenu. Elektronovou hustotu aproximujte tenkou kulovou slupkou

$$\rho(r) = \frac{A}{4\pi R^2} \delta(r - R).$$

Průměr fullerenu C_{60} je $2R = 7.1 \text{ Å}$.

1.5 Reciproké mříže

Odvoďte reciproké mříže čtvercové a hexagonální mříže.

1.6 Strukturální faktory kubických mříží

Odvoďte vztahy pro vyhasínání difrakcí kubické prosté, prostorově centrovaná, plošně centrovaná a diamantové mříže.

1.7 Strukturální faktor SnTe

Spočítejte strukturální faktor lichého difrakčního řádu v krystalu odvozeném od struktury soli kamenné při posunu kationové mříže o δ . Mříže jsou posunuty ve směru [111].

1.8 Difrakce polykrystalu

Difrakční píky byly naměřeny pro rozptylové úhly 19.2° , 27.3° , 33.6° , 38.9° , 43.8° , 48.2° , 56.3° a 60.0° . Použita byla vlnová délka 1.0 Å. Určete typ Bravaiho mřížky a mřížový parametr.

1.9 Difrakční úhly

Vypočítejte všechny možné difrakční úhly při difrakci záření o vlnové délce 0.1541 nm (charakteristická čára $\text{CuK}\alpha_1$) na krystalu Si (mřížkový parametr 0.54309 nm).

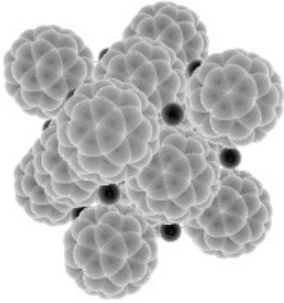
1.10 Difrakční efekty spojené s konečnou velikostí krystalu

Spočítejte Fourierovu transformaci nábojové hustoty malého krystalu s prostou kubickou mřížkou

$$\rho_{el}(x, y, z) = \sum_{j_1=-N_x}^{N_x} \sum_{j_2=-N_y}^{N_y} \sum_{j_3=-N_z}^{N_z} \rho_0(x - j_1 a, y - j_2 a, z - j_3 a)$$

a srovnajte výsledek s výrazem pro ρ_{el}^{FT} obsahujícím geometrický faktor. Odpovídá elektronová hustota zadaná v tomto příkladu elektronové hustotě uvažované výše, nebo je zde nějaký rozdíl? Diskutujte o souvislosti konečné velikosti krystalu s divergencí rozptýleného rentgenového záření.

1.11 RTG difrakce na A_xC_{60}



Experimentálně bylo zjištěno, že difrakční pík (200) fcc mřížky fullerenu C_{60} (mřížkový parametr $a = 14.11 \text{ \AA}$) je velmi slabý. Předpokládejte, že nábojová hustota fullerenu je reprezentována nábojem rovnoměrně rozloženým na povrchu koule s poloměrem 3.5 \AA . Spočítejte strukturální faktor molekuly C_{60} v této aproximaci a s jeho pomocí ukažte, že difrakční pík (200) je mnohem slabší než pík (111).

1.12 Difrakce diamantu

Difrakční záznam diamantu. Proveďte Williamsonovu-Hallovu analýzu.

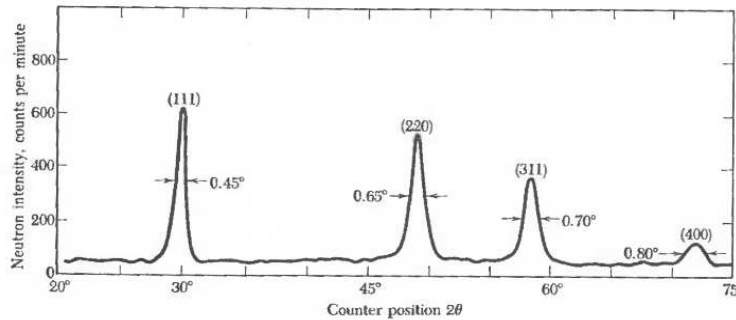


Figure 21 Neutron diffraction pattern for powdered diamond. (After G. Bacon.)

1.13 Tvarová funkce částice

Spočítejte Fourierovu transformaci krystalu tvaru kvádrů, koule a rotačního elipsoidu.

1.14 Intenzita v anti-Braggově poloze

Polovina monovrstvy je náhodně rozložena na povrchu monokrystalu, stejného složení jako podložní monokrystal. Spočítejte intenzitu podél krystalového truncation rod a určete intenzitu v anti-Braggově poloze. Jak lze tohoto výsledku použít pro detekci depozice v režimu vrstva po vrstvě?

1.15 Tenká pseudomorfní vrstva InAs na GaAs (001)

Spočítejte mřížový parametr ve směru kolmo na povrch vrstvy InAs vrstvy deponované na monokrystalické podložce GaAs, jestliže jde o tzv. pseudomorfní vrstvu. Krystalová mříž pseudomorfní vrstvy je stlačena v obou směrech v rovině povrchu tak, aby mřížový parametr v rovině povrchu odpovídal mřížovému parametru substrátu. Jaký tlak působí na InAs vrstvu v rovinách kolmých na povrch a jaká je hustota elastické energie v takové pseudomorfní vrstvě?

Elastičita kontinua: Mřížový parametr GaAs je $a_{\text{GaAs}} = 5.6533 \text{ \AA}$, InAs $a_{\text{InAs}} = 6.0583 \text{ \AA}$, elastické konstanty InAs $C_{11} = 8,34 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$, $C_{12} = 4,54 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$, $C_{44} = 3,95 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$.

1.16 Odrazivost a polarizace

Odvoďte a porovnejte vztahy pro rtg odraz v s- a p-polarizaci.

1.17 Odrazivost vrstvy

Odvod'te vztah pro rtg odraz na jedné vrstvě.

1.18 Simulace vrstev a multivrstev

Použijte software pro simulaci různých vrstev a multivrstev. Vhodný software je GenX: <https://aglavic.github.io/genx/>
A. Glavic and M. Björck, *GenX 3: the latest generation of an established tool*, J. Appl. Cryst. **55**, 1063-1071 (2022).

1.19 Fitování vrstev a multivrstev

1.20 Dynamická teorie difrakce

1.21 Semikinematická teorie

Najděte vztahy pro rozptyl na částicích na povrchu a uvnitř materiálu.

1.22 Semikinematická teorie

Ověřte konzistenci popisu na hladkém povrchu v semikinematické a dynamické teorii.

1.23 Monochromátory různé difrakce

Spočtete šířku dynamické difrakční křivky na Si v symetrické Braggově difrakci 111, 220 a 400 pro $K\alpha$ čáru mědi.

$$FWHM = \frac{2\sqrt{|\chi_h\chi_{-h}|}}{\sin 2\theta_B} \sqrt{\frac{1}{|b|}}$$

pro symetrickou Braggovu difrakci platí $b = -1$.

$$\chi_h = -\frac{\lambda^2 r_e}{\pi a^3} \sum_j f_j e^{i\mathbf{h}\cdot\mathbf{r}_j}, \quad r_e = 2.82 \times 10^{-15} \text{ m}$$

Hodnoty:

$$\begin{aligned} \lambda &= 1.54056 \text{ \AA}, E = 8048 \text{ eV} \\ a &= 5.4309 \text{ \AA} \\ f(111) &= 10.53 \quad f(220) = 8.72 \quad f(400) = 7.52 \end{aligned}$$

1.24 Monochromátory různé vlnové délky

Spočtete šířku dynamické difrakční křivky na Si v symetrické Braggově difrakci 220 pro $K\alpha$ čáru mědi, železa a molybdenu.

Hodnoty:

$$\begin{aligned} \text{Fe} : \lambda &= 1.54056 \text{ \AA}, E = 8048 \text{ eV} \\ \text{Cu} : \lambda &= 1.936 \text{ \AA}, E = 6398 \text{ eV} \\ \text{Mo} : \lambda &= 0.7093 \text{ \AA}, E = 17441 \text{ eV} \end{aligned}$$

1.25 Monochromátory různé krystaly

Spočtete šířku dynamické difrakční křivky na Si, Ge a diamantu v symetrické Braggově difrakci 111 pro $K\alpha$ čáru mědi.

Hodnoty:

$$\begin{aligned} \lambda &= 1.54056 \text{ \AA}, E = 8048 \text{ eV} \\ \text{C} : a &= 3.567 \text{ \AA} \quad f(111) = 3.058 \\ \text{Si} : a &= 5.4309 \text{ \AA} \quad f(111) = 10.53 \\ \text{Ge} : a &= 5.658 \text{ \AA} \quad f(111) = 27.50 \end{aligned}$$