

## Лекция № 5

### Методы исследования структуры кристаллов

Угол, на который отклоняется дифрагированная волна, зависит от структуры кристалла и от длины волны падающего излучения Дифракция рентгеновских лучей

$$\varepsilon = h\nu = hc/\lambda,$$

$$h = 6,62 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек} = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{сек}$$

$$\lambda (\text{Å}) = \frac{12,4}{\varepsilon (\text{кэВ})},$$

10-50  
кэВ

Тормозное и характеристическое излучение

## Дифракция нейтронов

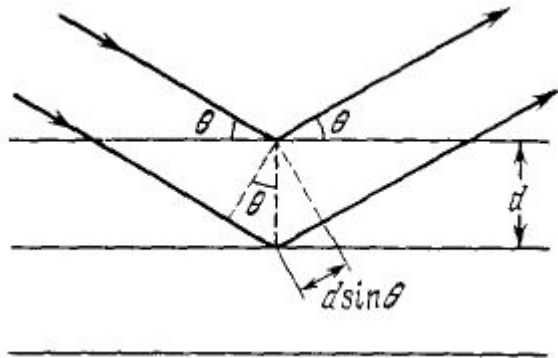
$$\varepsilon = \frac{h^2}{2M_n\lambda^2} \quad M_n = 1,675 \cdot 10^{-24} \text{ г} \quad \varepsilon = \frac{p^2}{2M_n}, \quad \lambda (\text{Å}) \approx \frac{0,28}{[\varepsilon (\text{эВ})]^{1/2}}$$

**Волны де Бройля** — волны вероятности (или волны амплитуды вероятности), определяющие плотность вероятности обнаружения объекта в заданной точке конфигурационного пространства. В соответствии с принятой терминологией говорят, что волны де Бройля связаны с любыми частицами и отражают их волновую природу.

## Дифракция электронов

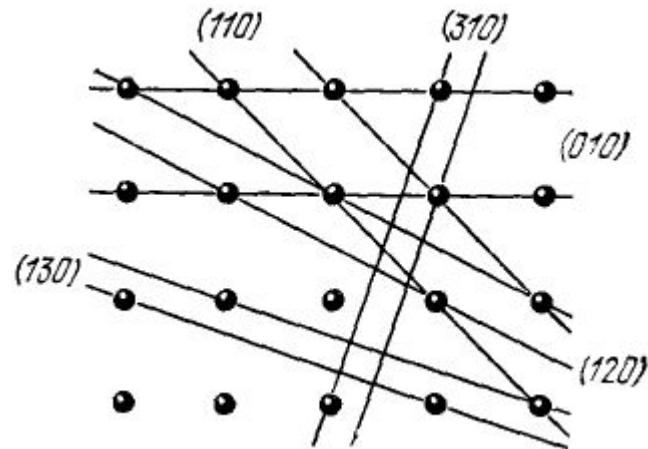
$$\varepsilon = \frac{h^2}{2m\lambda^2}, \quad m = 0,911 \times 10^{-27} \text{ г}, \quad \lambda (\text{Å}) \approx \frac{12}{[\varepsilon (\text{эВ})]^{1/2}}.$$

# Закон Брэгга (Условие Вульфа-Брэгга)



$$2d \sin \theta = n\lambda.$$

$$\lambda \leq 2d.$$

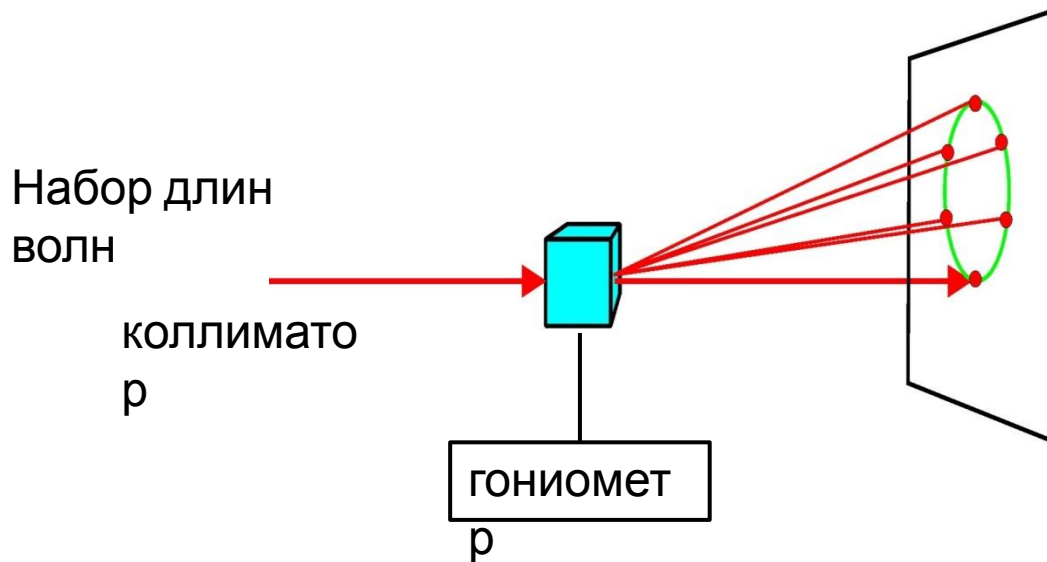


# Методы исследования структуры кристаллов

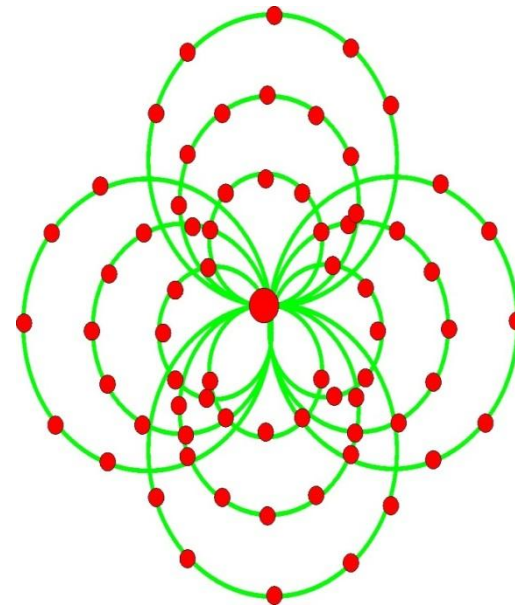
## Дифракция рентгеновских лучей

### Рентгенограмма Лауэ

$$\lambda < \Lambda$$



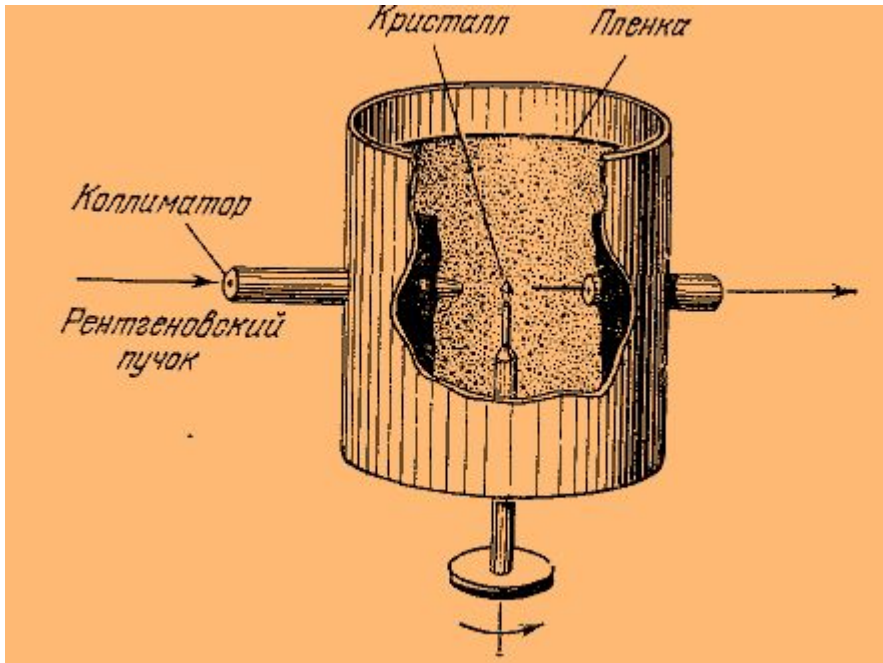
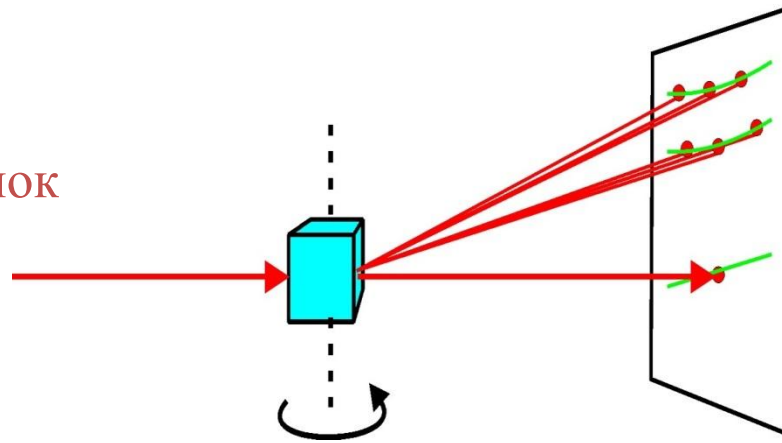
Спектральный интервал: 0.2 – 1 Å



# Рентгенограмма вращения

Монохроматичный пучок

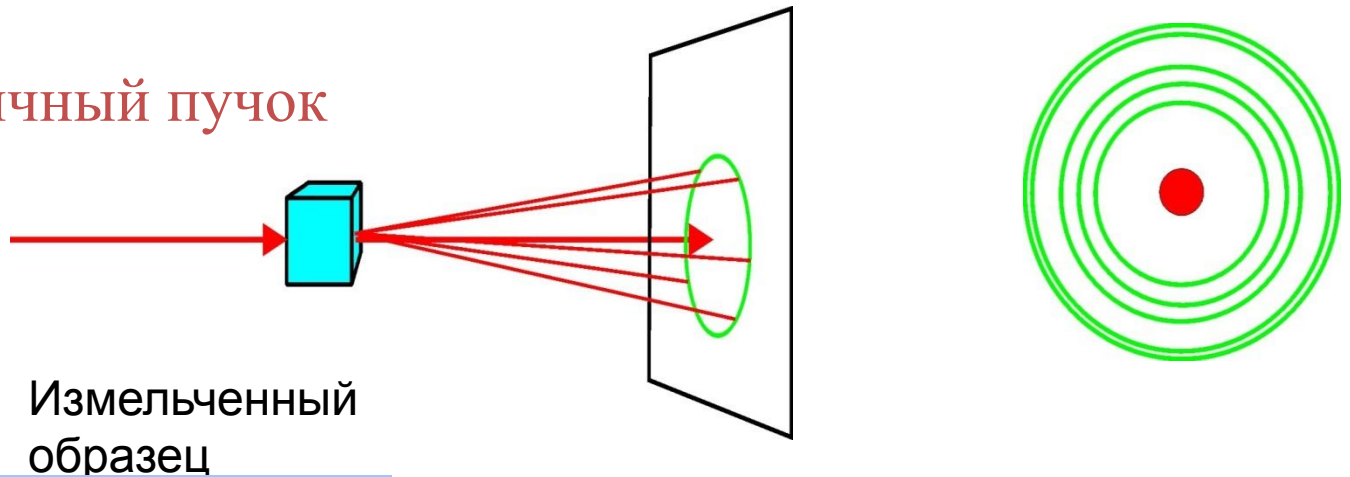
X-ray или  
нейтроны



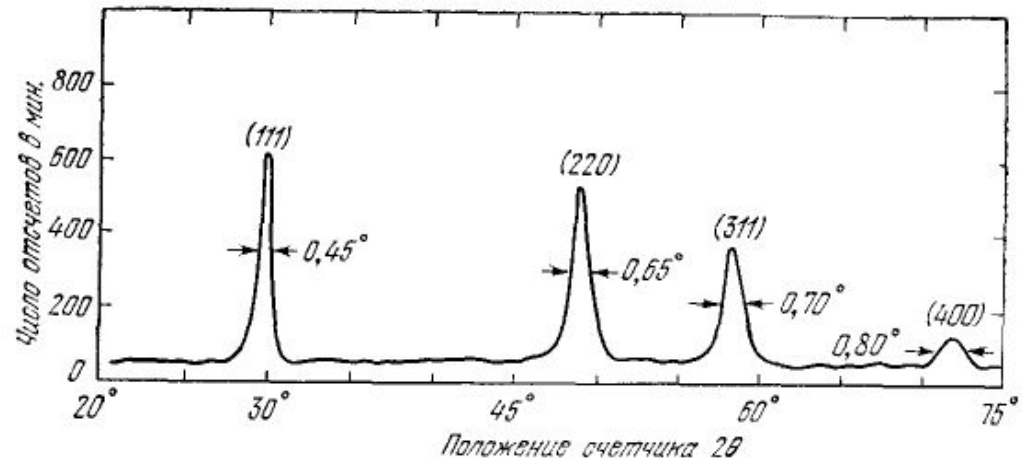
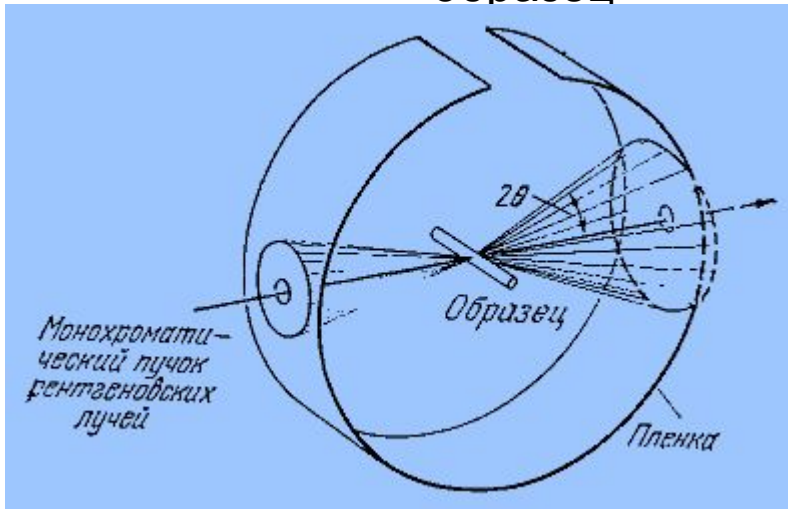
Метод  
колебаний  
Гониометр  
Вайсенберга

# Порошковая рентгенограмма

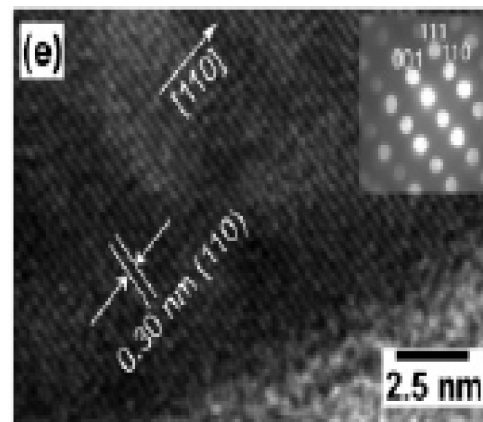
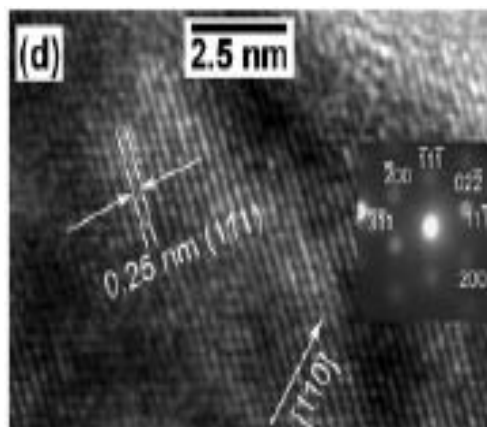
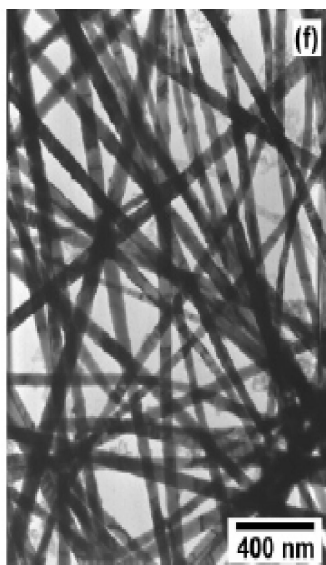
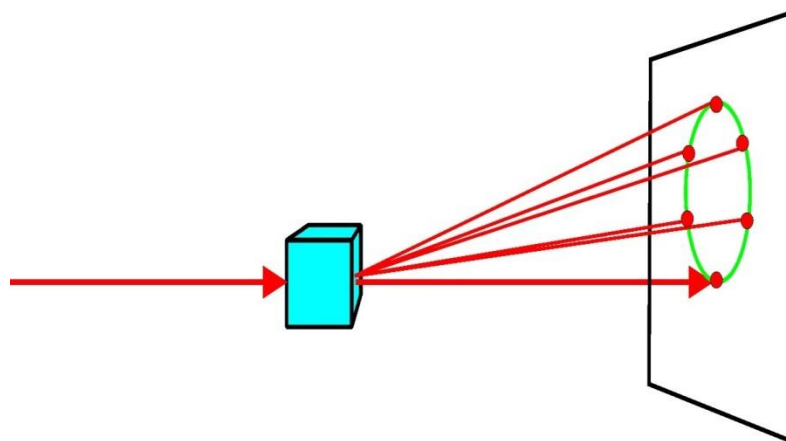
Монохроматичный пучок



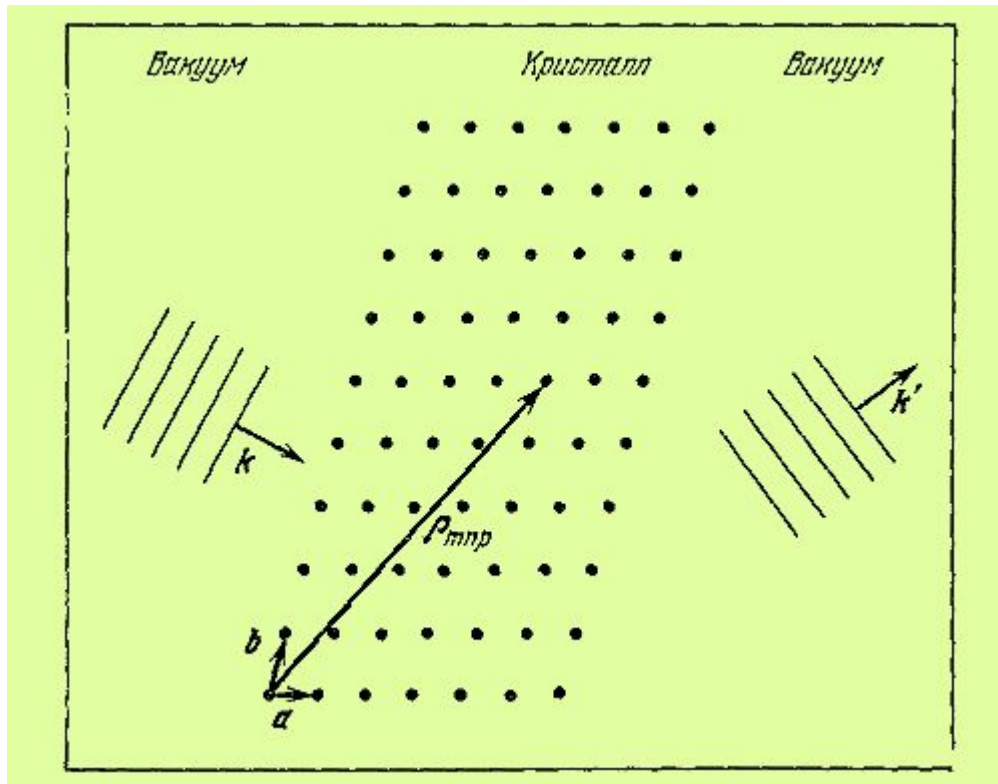
Измельченный образец



# Дифракция электронов



# Вывод уравнения Лауэ для амплитуды рассеянной волны



$$\omega = ck,$$

$$\omega' = \omega, \quad k' = k.$$

$$E(\mathbf{x}) = E_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)},$$

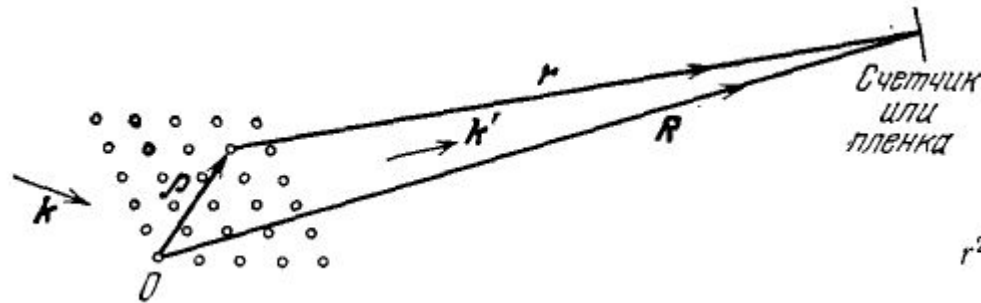
$$E_{sc} = CE(\rho) \frac{e^{ikr}}{r} = CE_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \rho} \frac{e^{i(kr - \omega t)}}{r}.$$

<sup>1)</sup> Волновой вектор  $\mathbf{k}$  нормален к плоскостям равной фазы; его величина равна  $2\pi/\lambda$ , где  $\lambda$  — длина волны.

<sup>2)</sup> Мы предполагаем, что кристалл имеет малые размеры, так что в первом приближении затуханием падающей волны внутри кристалла можно пренебречь.



# Вывод уравнения Лауэ для амплитуды рассеянной волны



$$\rho + r = R,$$

$$r^2 = (R - \rho)^2 = R^2 - 2\rho R \cos(\rho, \mathbf{R}) + \rho^2.$$

$$r = R \left[ 1 - \frac{2\rho}{R} \cos(\rho, \mathbf{R}) + \left(\frac{\rho}{R}\right)^2 \right]^{1/2} \approx R \left( 1 - \frac{\rho}{R} \cos(\rho, \mathbf{R}) + \dots \right).$$

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) E_{sc}(r) = 0,$$

$$\nabla^2 E = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}.$$

$$r \approx R - \rho \cos(\rho, \mathbf{R}),$$

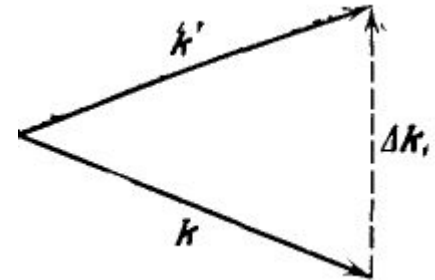
$$e^{i(\mathbf{k} \cdot \rho + kr)} = e^{ikR} \exp \{ i [\mathbf{k} \cdot \rho - k\rho \cos(\rho, \mathbf{R})] \}.$$

$$k\rho \cos(\rho, \mathbf{R}) = k'\rho \cos(\rho, \mathbf{k}') = \mathbf{k}' \cdot \rho.$$

## Вывод уравнения Лауэ для амплитуды рассеянной волны

$$e^{i(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho} + k r)} = e^{i k R} \exp [i(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho} - \mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\rho})] = e^{i k R} \exp (-i \boldsymbol{\rho} \cdot \Delta \mathbf{k}),$$

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \quad \mathbf{k}' = \mathbf{k} + \Delta \mathbf{k}.$$



$$E_{sc}(r) = \left( \frac{C E_0 e^{i k R} e^{-i \omega t}}{R} \right) \exp (-i \boldsymbol{\rho}_{mnp} \cdot \Delta \mathbf{k}),$$

$$\int dV n(\boldsymbol{\rho}) \exp (-i \boldsymbol{\rho} \cdot \Delta \mathbf{k}).$$

$$\mathcal{A} \equiv \sum_{mnp} \exp [-i(m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}) \cdot \Delta \mathbf{k}].$$

$$\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi h, \quad \mathbf{b} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi k, \quad \mathbf{c} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi l.$$

## Обратная решётка

$$\Delta \mathbf{k} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C},$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{a} = 2\pi, \quad \mathbf{B} \cdot \mathbf{a} = 0, \quad \mathbf{C} \cdot \mathbf{a} = 0,$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{b} = 0, \quad \mathbf{B} \cdot \mathbf{b} = 2\pi, \quad \mathbf{C} \cdot \mathbf{b} = 0,$$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{c} = 0, \quad \mathbf{B} \cdot \mathbf{c} = 0, \quad \mathbf{C} \cdot \mathbf{c} = 2\pi.$$

Основные векторы обратной

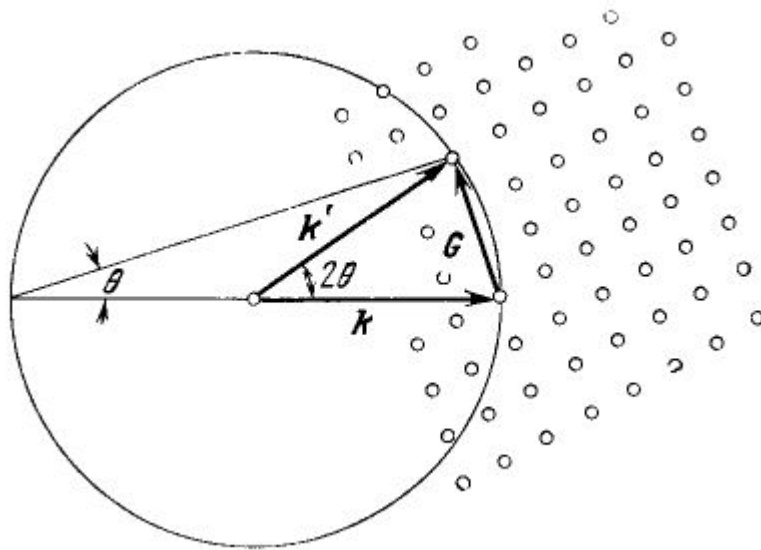
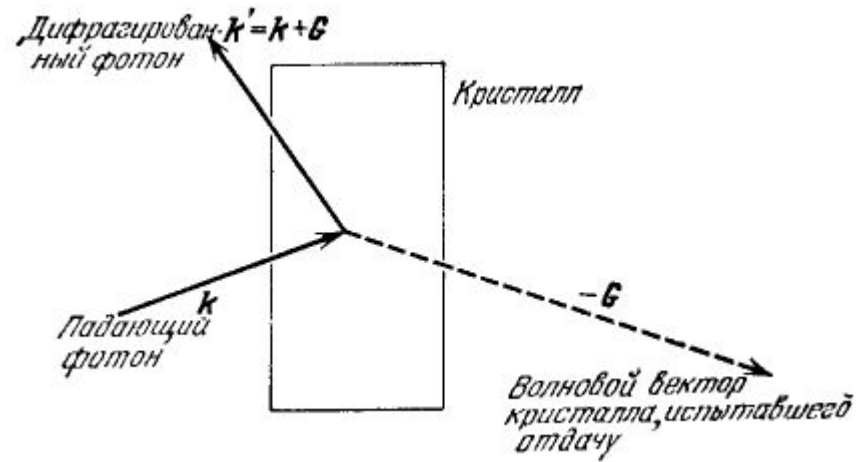
решетки

$$\mathbf{A} = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}, \quad \mathbf{B} = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}, \quad \mathbf{C} = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}},$$

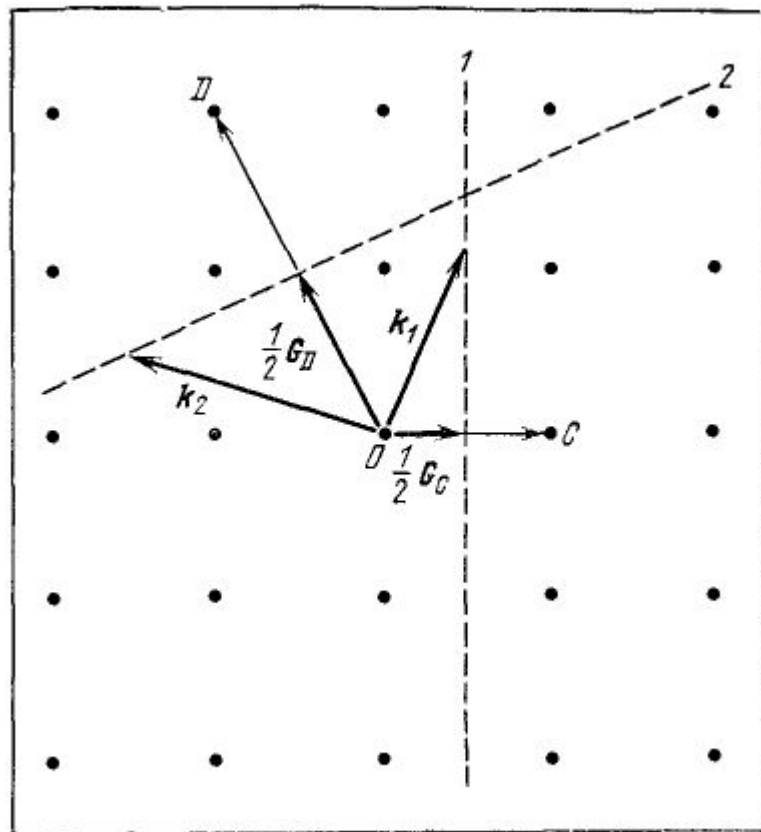
$$\mathbf{G} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C} \quad (h, k, l - \text{целые числа}).$$

# Построение Эвальда

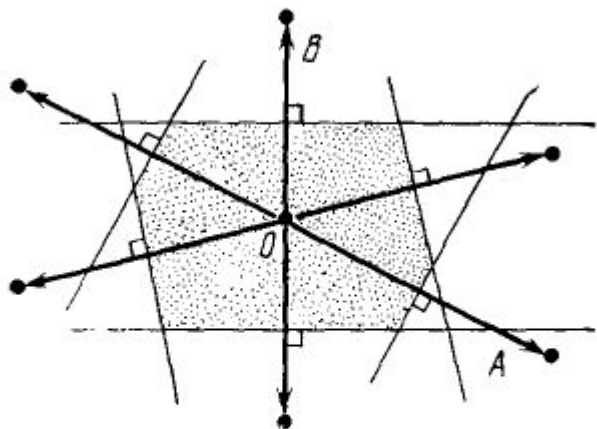
$$2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} + G^2 = 0.$$



# Зона Бриллюэна

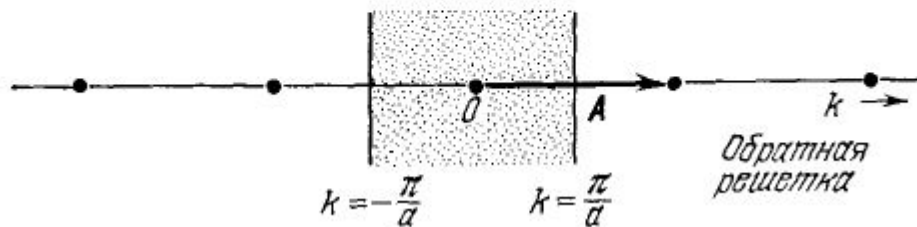


# Зона Бриллюэна



$$a = a\hat{x}, \quad b = a\hat{y}, \quad c = a\hat{z}.$$

$$A = 2\pi \frac{b \times c}{a \cdot b \times c} = \frac{2\pi}{a} \hat{x}, \quad B = \frac{2\pi}{a} \hat{y}, \quad C = \frac{2\pi}{a} \hat{z}.$$



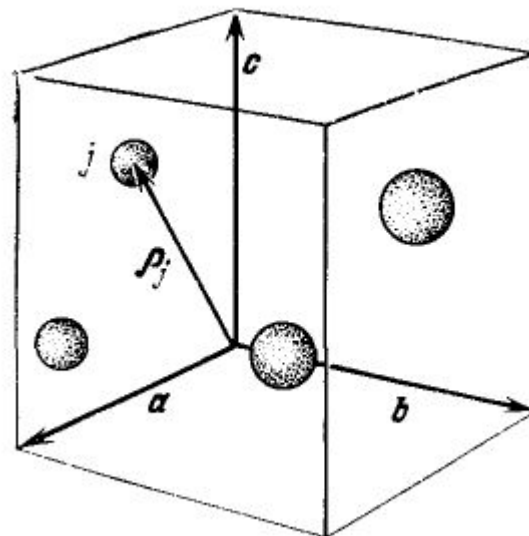
## Структурный фактор базиса

$$\mathbf{G}(hkl) = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C},$$

$$\boldsymbol{\rho}_j = x_j\mathbf{a} + y_j\mathbf{b} + z_j\mathbf{c},$$

$$\boldsymbol{\rho}_{mnp} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}.$$

$$n(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{mnp} \sum_{j=1}^s c_j(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_j - \boldsymbol{\rho}_{mnp}),$$



$$f_j = \int dV c_j(\boldsymbol{\rho}') \exp(-i\boldsymbol{\rho}' \cdot \Delta\mathbf{k}),$$

Форм-  
фактор

$$\mathcal{P}_{\mathbf{G}} = \sum_j f_j \exp(-i\boldsymbol{\rho}_j \cdot \mathbf{G})$$

$$(hkl), \quad \mathcal{P}(hkl) = \sum_j f_j \exp[-i2\pi(x_jh + y_jk + z_jl)].$$

# Структурный фактор базиса

Физический  
СМЫСЛ

