

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ

Факультет физики

Подготовка к экзамену

Работу выполнил студент 3 курса  
Захаров Сергей Дмитриевич



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

Москва  
2020

## Содержание

<b>1. Метод исследования поверхности: дифракция на медленных электронах</b>	<b>2</b>
1.1. Описание и установка . . . . .	2
1.2. Почему используются низкие энергии? . . . . .	2
1.3. Что позволяет? . . . . .	3
1.4. Отличия от дифракции быстрых электронов . . . . .	3
<b>2. Основы двумерной кристаллографии</b>	<b>3</b>
2.1. Индексы Миллера . . . . .	4
<b>3. Симметрия кристаллов</b>	<b>4</b>
3.1. Центр симметрии . . . . .	4
3.2. Плоскость симметрии . . . . .	5
3.3. Оси симметрии . . . . .	5
<b>4. Геометрическая интерпретация условий дифракции по Эвальду</b>	<b>6</b>
4.1. Сфера Эвальда . . . . .	7
4.2. Сфера ограничения . . . . .	8

# 1. Метод исследования поверхности: дифракция на медленных электронах

## 1.1. Описание и установка

Метод заключается в анализе картин дифракции низкоуровневых электронов с энергией 30-200 эВ, упруго рассеянных от исследуемой поверхности.

Схема типичной экспериментальной установки представлена на рисунке 1. В электронной пушке электроны, испускаемые катодом (находящимся под отрицательным потенциалом  $-V$ ), ускоряются до энергии  $eV$ , а затем движутся и рассеиваются на образце в бесполом пространстве, поскольку первая сетка дифрактометра и образец заземлены. Вторая и третья сетки, находящиеся под потенциалом чуть меньше потенциала катода ( $V - \Delta V$ ), служат для отсеечения неупруго рассеянных электронов. Четвертая сетка заземлена и экранирует другие сетки от флуоресцентного экрана, находящегося под потенциалом порядка  $+5$  кВ. Таким образом, электроны, упруго рассеянные на поверхности образца, после прохождения тормозящих сеток ускоряются до высоких энергий, чтобы вызвать флуоресценцию экрана, на котором и наблюдается дифракционная картина. Экран может заменяться матрицей.

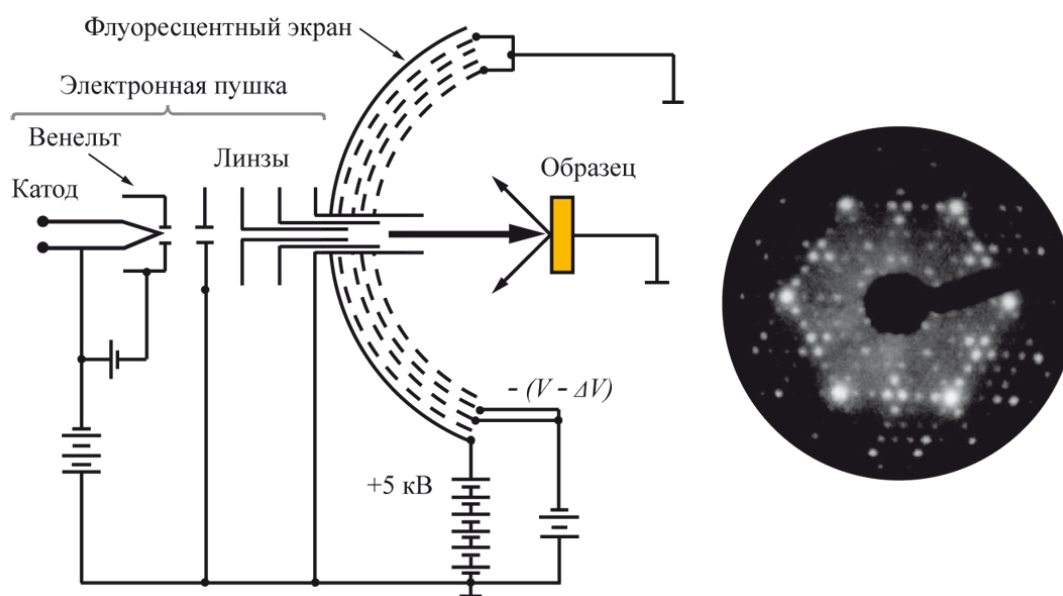


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для прямого наблюдения картин ДМЭ

## 1.2. Почему используются низкие энергии?

- 1) Длина волны де-Бройля для электронов с энергией 30–200 эВ составляет примерно 0.1–0.2 нм, что удовлетворяет условию дифракции на атомных структурах, а именно, длина волны равна или меньше межатомных расстояний.
- 2) Средняя длина пробега таких низкоэнергетических электронов составляет несколько атомных слоев. Вследствие этого большинство упругих рассеяний происходит в самых верхних слоях образца (которые нас и интересуют), следовательно, они дают максимальный вклад в картину дифракции.

### 1.3. Что позволяет?

- 1) Качественно оценить структурное совершенство поверхности — от хорошо упорядоченной поверхности наблюдается картина ДМЭ с четкими яркими рефlekсами и низким уровнем фона.
- 2) Определить обратную решетку поверхности из геометрии дифракционной картины.
- 3) Определить атомную структуру поверхности путем сравнения зависимостей интенсивности дифракционных рефlekсов от энергии электронов, рассчитанных для структурных моделей, с зависимостями, полученными в эксперименте.

### 1.4. Отличия от дифракции быстрых электронов

Методы дифракции медленных и быстрых электронов различаются энергией используемых электронов и, соответственно, различной геометрией (в ДМЭ пучок электронов падает на исследуемую поверхность практически перпендикулярно, а в ДБЭ под скользящим углом порядка  $1 - 5^\circ$ ). Оба метода дают сходную информацию о структуре поверхности. Преимуществом ДМЭ является более простая конструкция, а также более наглядная и удобная для интерпретации получаемая информация.

## 2. Основы двумерной кристаллографии

В кристаллографии принята система координат, представленная на рисунке 2. В общем случае она не всегда прямоугольная.

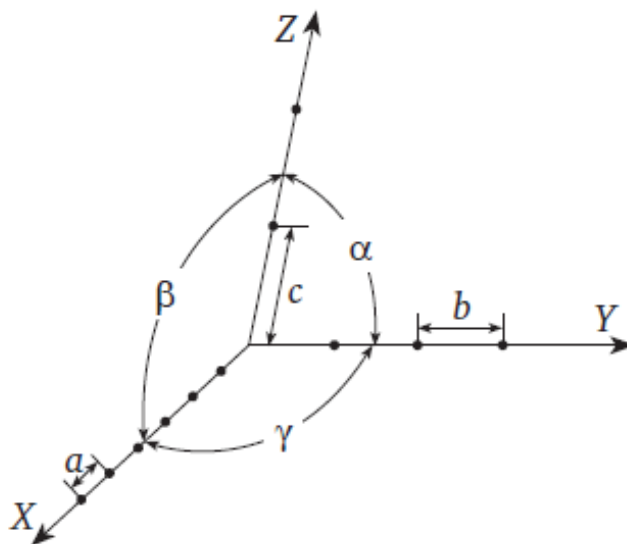


Рис. 2.  $a, b, c$  — масштабы по осям координат;  $\alpha, \beta, \gamma$  — углы между осями координат

Положение любого узла представимо в виде:

$$\vec{r} = \vec{a}m + \vec{b}n + \vec{c}p$$

$m, n, p$  — целые числа. При обозначении индексы узла заключаются в двойные скобки (см. рисунок 3).

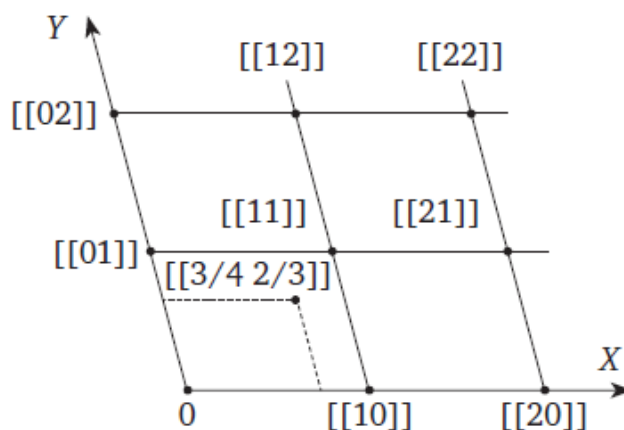


Рис. 3. Пример обозначения узлов на плоской решетке

## 2.1. Индексы Миллера

Пусть есть плоскость, пересекающая оси координат на координатах  $x_1, x_2, x_3$ . Возьмем обратные величины и умножим на такое число, чтобы получилось минимальное целое:

$$h = \frac{N}{x_1} \quad k = \frac{N}{x_2} \quad l = \frac{N}{x_3} \quad (1)$$

Эти штуки называются **Индексами Миллера** и записываются в круглых скобках:  $(hkl)$ . Созданы из канонического уравнения плоскости.

## 3. Симметрия кристаллов

Симметрия кристаллов выделяется с помощью элементов симметрии:

- 1) Центра симметрии
- 2) Плоскостей симметрии
- 3) Осей симметрии

### 3.1. Центр симметрии

Центр симметрии (инверсии) связывает противоположные инверсионно равные (или обращено равные) части кристалла. Он совпадает с геометрическим центром кристалла. От слова *Centrum* он обозначается буквой *C* (по символике Бравэ) или  $\bar{1}$  (по интернациональной символике).

При наличии центра симметрии все диаметрально противоположные грани и ребра кристалла должны быть попарно инверсионно равны и параллельны. Это на пальцах можно проверить, положив кристалл на горизонтальную плоскость стола. Если все грани и ребра кристалла попарно параллельны и инверсионно равны, центр симметрии в кристалле есть. Если центр симметрии отсутствует, то в таком кристалле сверху окажется вершина, ребро, наклонная или параллельная, но не равная нижней, грань. Наличие или отсутствие в кристалле центра симметрии следует зафиксировать в рабочей таблице.

### 3.2. Плоскость симметрии

Плоскость симметрии делит кристалл на две зеркально-равные половины. Плоскость симметрии связывает зеркально равные части кристалла. От слова *Planum* обозначается буквой *P* (по Бравэ), от слова *mirror* (зеркало, отражать) обозначается буквой *m* (интернационально), графически обозначается двойной линией (как двухсторонне зеркало).

Для определения плоскости симметрии кристалл мысленно рассекается плоскостью, проходящей через его центр. Если при этом слева и справа от плоскости симметрии все части кристалла (границы, ребра, вершины) будут повторяться как предмет и его зеркальное отображение, то такая плоскость будет являться плоскостью симметрии. В прямоугольнике (см. рисунок 4) можно провести только две плоскости симметрии. Плоскость, делящая прямоугольник на две равные части, но не зеркально, не является плоскостью симметрии.

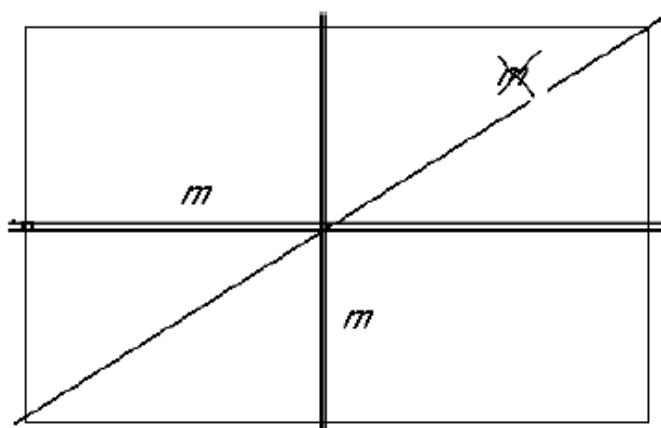


Рис. 4. Плоскости симметрии прямоугольника

Куб (см. рисунок 5) имеет 9 плоскостей симметрии: три- координатных *P* (слева), шесть диагональных *P* (справа).

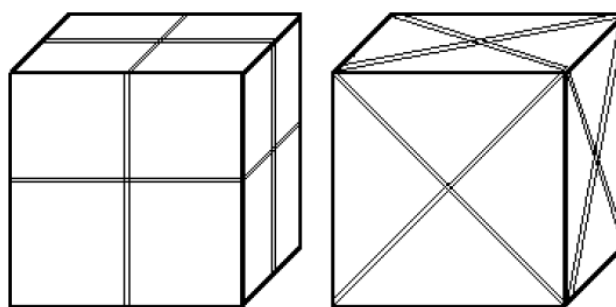


Рис. 5. Плоскости симметрии куба

### 3.3. Оси симметрии

Ось симметрии - это линии, которые симметрично связывает конгруэнтно равные (совместимо равные) части кристалла. Вокруг оси симметрии на равных угловых и линейных расстояниях располагаются конгруэнтно равные части кристалла, так что при полном повороте вокруг оси (на  $360^\circ$ ) они повторяются  $n$  раз. Такие оси называют поворотными осями симметрии  $n$ -го порядка.

В некоторых кристаллах, помимо поворотных осей симметрии, могут быть инверсионные оси симметрии, в которых операция симметричного поворота вокруг оси совмещается с операцией симметричного отражения в центре кристалла. Порядок инверсионной оси удваивается по сравнению с порядком поворотной оси.

По Браве от слова *Linie* они обозначаются  $L_n$  (читается - ось симметрии  $n$ -го порядка). В кристаллах могут быть поворотные оси симметрии первого  $L_1$ , второго  $L_2$ , третьего  $L_3$ , четвертого  $L_4$ , шестого  $L_6$  порядков и инверсионные оси симметрии  $Li_1$ ,  $Li_2$ ,  $Li_3$ ,  $Li_4$ ,  $Li_6$ . Кроме того,  $Li_1 = C$ ,  $Li_2 = P$ ,  $Li_3 = L_3C$ ,  $Li_4 = L_2$ ,  $Li_6 = L_3P$ .

По интернациональной символике поворотные оси симметрии обозначаются числом, указывающим их порядок, т.е. 1, 2, 3, 4 и 6, а инверсионные оси симметрии —  $\bar{1}$ ,  $\bar{2}$ ,  $\bar{3}$ ,  $\bar{4}$  и  $\bar{6}$ .

Графически оси симметрии обозначаются многоугольником, число углов которого равно порядку оси симметрии.

В кубе:  $3L_4$  - (3 оси симметрии 4-го порядка) проходят через середины противоположных квадратных граней;  $4L_3$  - (4 оси симметрии 3-го порядка) проходят через противоположные вершины;  $6L_2$  - (6 осей симметрии 2-го порядка) проходят через середины противоположных ребер куба.

Для объяснения "на пальцах" полезно запомнить, что концы осей симметрии в кристаллах могут выходить через вершины, через центры граней и через середины ребер. Следовательно, при определении осей симметрии именно за эти элементы и нужно брать кристалл двумя пальцами и вращать его вокруг этой оси.

**Есть еще трансляционная симметрия** — про параллельный перенос. Она запрещает  $L_5$ .

## 4. Геометрическая интерпретация условий дифракции по Эвальду

Условия главных максимумов записывается в следующем виде:

$$\frac{\vec{s} - \vec{s}_0}{\lambda} = \vec{H} \quad \text{или} \quad \vec{K} - \vec{K}_0 = \vec{H} \quad (2)$$

Вторая версия фактически означает, что три волновых вектора ( $\vec{K}_0$  — падающий,  $\vec{K}$  — дифрагированный и  $\vec{H}$  — вектор обратной решетки, который перпендикулярен плоскостям прямой решетки с индексами  $(hkl)$ ) связаны между собой в виде треугольника и лежат в одной плоскости, как это показано на рисунке 6.

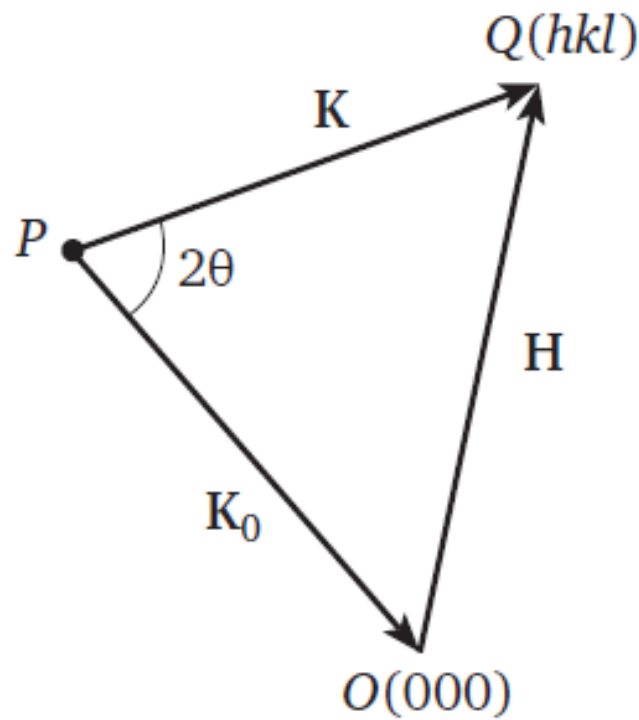


Рис. 6. Векторное условие образования максимумов

#### 4.1. Сфера Эвальда

Рассмотрим какую-то обратную решетку (см. рисунок 7). Из любой ее точки  $P$  проведем волновой вектор падающей волны  $\vec{K}_0$  в любой узел обратной решетки, который в дальнейшем будем называть нулевым узлом обратной решетки  $O(000)$ .

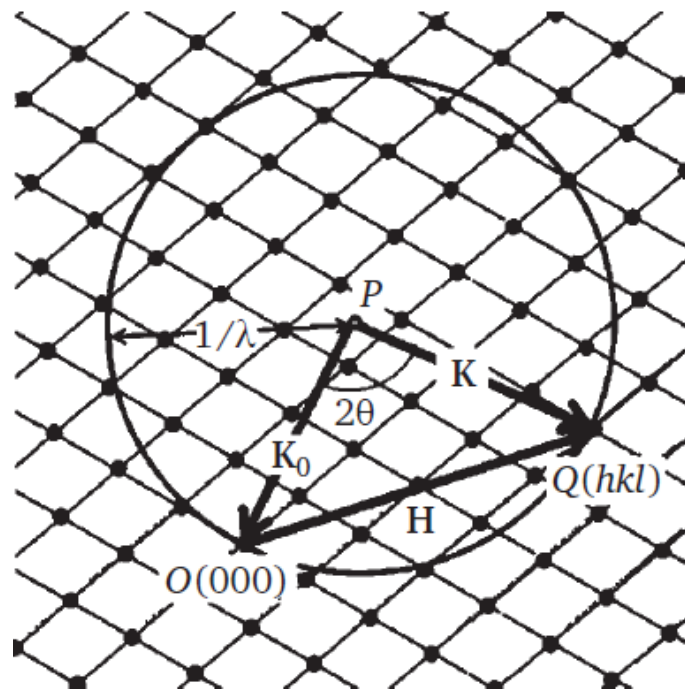


Рис. 7. Геометрическая интерпретация условий дифракции (сфера Эвальда)



Учтем, что каждый узел обратной решетки — система параллельных плоскостей в прямой решетке с индексами  $(hkl)$  и расстоянием между плоскостями  $d = 1/|H|$ . Вокруг точки  $P$  проведем сферическую поверхность радиусом  $|K_0| = 1/\lambda$ . Эта поверхность называется **сферой Эвальда**.

Будем поворачивать обратную решетку вокруг точки нулевого узла обратной решетки  $O(000)$  так, чтобы на ее поверхность попадали различные узлы обратной решетки, например какой-то узел  $Q(hkl)$ . В таком случае при пересечении сферы Эвальда с любым узлом образуется треугольник из трех векторов  $\vec{K}$ ,  $\vec{K}_0$ ,  $\vec{H}$ . Это значит, что для системы плоскостей с индексами  $(hkl)$  выполнено условие дифракции.

## 4.2. Сфера ограничения

Наряду со сферой Эвальда в структурном анализе вводится понятие сферы ограничения. Эта сфера имеет радиус  $R_2 = 2/\lambda$ . Она строится из точки  $(000)$ . Физический смысл такой конструкции состоит в том, что все узлы обратной решетки, попадающие внутрь сферы ограничения, обязательно принимают участие в формировании дифракционной картины для данной длины волны  $\lambda$ . Взаимное расположение сферы Эвальда и сферы ограничения представлено на рисунке 8.

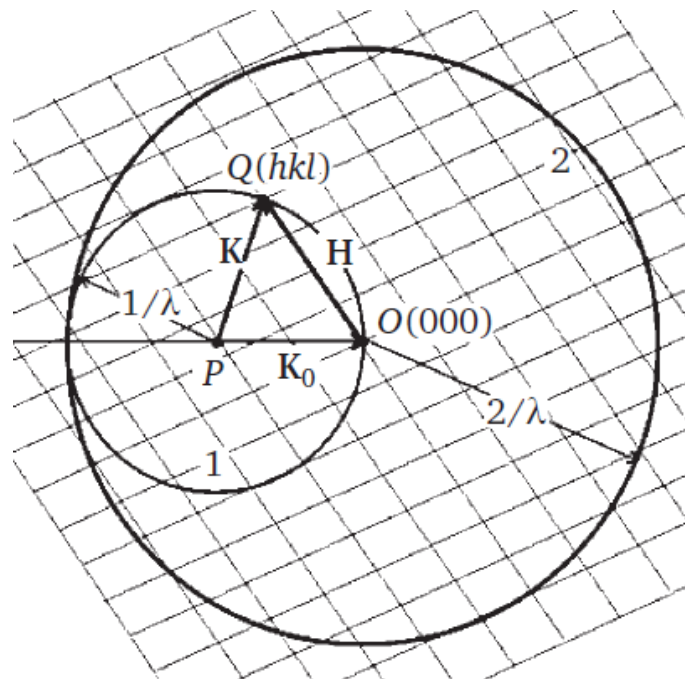


Рис. 8. Взаимное расположение сферы Эвальда и сферы ограничений