**Задача 1.1**

Найдите индексы узловых прямых, проходящих через узловые точки:

а) –1, 27;

б) –10, 18;

в) –20, 22.

*Решение*

**1.1а.** Соединим узлы *1*, *27* линией (рис. 1.17, *а*). Эта линия проходит через начало координат, а узел *27* имеет индексы координаты [[222]]. Следовательно, узловой ряд имеет индексы [111].

**1.1б.** Соединим узлы *10*, *18* линией (рис. 1.17, *б*). Полученная линия не проходит через начало координат. Для решения задачи обозначенную линию необходимо перенести параллельно самой себе так, чтобы она проходила через начало координат системы (например, в положение *1*, *9*). Теперь линия проходит через начало координат и второй ее конец (точка *9*) имеет координаты [[220]]. Следовательно, индексы узлового ряда будут [110].

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **К задаче 1.1.б** | **К задаче 1.1б б** | **К задаче 1.1.б в** |
| *а* | *б* | *в* |

*Рис. 1.17.* **К задаче 1.1**

**1.1б.** Соединим узлы *10*, *18* линией (рис. 1.17, *б*). Полученная линия не проходит через начало координат. Для решения задачи обозначенную линию необходимо перенести параллельно самой себе так, чтобы она проходила через начало координат системы (например, в положение *1*, *9*). Теперь линия проходит через начало координат и второй ее конец (точка *9*) имеет координаты [[220]]. Следовательно, индексы узлового ряда будут [110].

**1.1в.** Соединим узлы *20*, *22* линией (рис. 1.17, *в*). Полученная линия не проходит через начало координат. Поэтому для решения задачи ее необходимо перенести параллельно самой себе так, чтобы она проходила через начало координат системы (например, в положение   
*1*, –*1*). Теперь линия проходит через начало координат и второй ее конец имеет координаты  Следовательно, индексы узлового ряда будут

**Задача 1.2**

Определите индексы Миллера плоскостей, проходящих через узловые точки:

а) 3, 7, 19;

б) 1, 9, 19;

в) 21, 14, 16.

*Решение*

**1.2а.** Плоскость, проходящая через узлы *3*, *7*, *19* (рис. 1.18, *а*), осекает на осях координат отрезки 2, 2, 2. Для определения индексов Миллера необходимо взять обратные величины этих отрезков и умножить их на некоторую величину, так чтобы получились минимальные целые числа:



Полученные три числа и есть индексы Миллера для плоскостей этого типа, т. е. (111).

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| К задаче 1.2.а  *а* | К задаче 1.2.б*б* | К задаче 1.2.в*в* |

*Рис. 1.18.* **К задаче 1.2**

**1.2б.** Плоскость, проходящая через узлы *1*, *9*, *19* (рис. 1.18, *б*), не пересекает оси координат. Поэтому ее необходимо перенести параллельно самой себе, например, вдоль оси *Y* на две масштабные единицы в левую часть системы координат. Тогда плоскость будет пересекать оси координат в точках 2, 2, ∞. Определим индексы Миллера:



Индексы Миллера для плоскостей этого типа будут (110).

**1.2в.** Плоскость, проходящая через узлы *14*, *16*, *21* (рис. 1.18, *в*), не пересекает оси координат. Поэтому ее необходимо перенести параллельно самой себе, например, вдоль оси *Z* на одну масштабную единицу вниз и вдоль оси *Y* на две масштабные единицы. Полученная плоскость будет пересекать оси координат в точках *x* = –1; *y* = 2; *z* = 1. Определим индексы Миллера:



**Задача 1.3**

Определите индексы Миллера для трех плоскостей, отсекающих на осях отрезки   
1, 2, 3; 2, 4, 6; 3, 6, 9.

*Решение*

|  |  |
| --- | --- |
| Определяем индексы Миллера для заданных плоскостей, отсекающих на осях:   * отрезки 1, 2, 3:      * отрезки 2, 4, 6:      * отрезки 3, 6, 9: | К задаче 1.3-1  *Рис. 1.19.* **К задаче 1.3** |

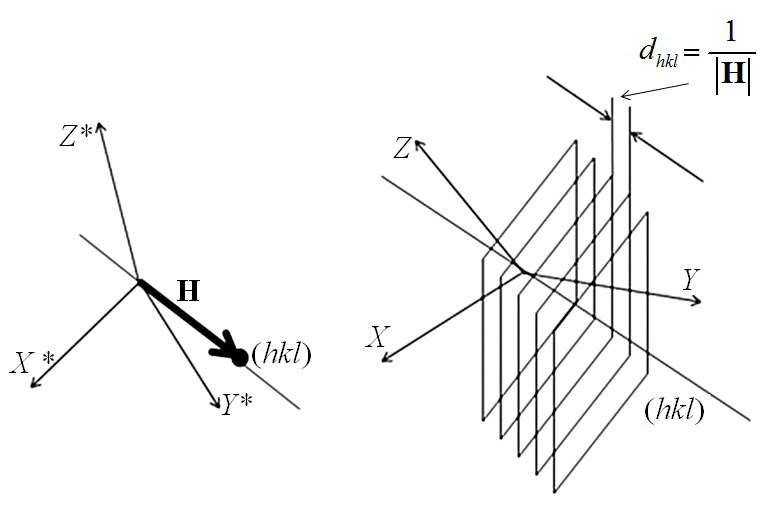
Все три плоскости имеют один и тот же набор индексов Миллера. Это означает, что все плоскости параллельные друг другу, с одинаковыми межплоскостными расстояниями *dhkl*, имеют одинаковые индексы Миллера.

**Задача 1.4**

Чему в прямой решетке соответствует точка в обратной решетке?

*Решение*

На рис. 1.20 показаны системы координат обратного (рис. 1.20, *а*) и прямого   
(рис. 1.20, *б*) пространства. Точка в обратном пространстве соответствует бесконечному количеству плоскостей, параллельных друг другу, имеющих одно межплоскостное расстояние *d* и перпендикулярных вектору **H**.

****

*а б*

*Рис. 1.20.* **К задаче 1.4**

**Задача 1.5**

Определите индексы плоскости, параллельной осям *Y* и *Z*.

*Решение*

Индексы осей: *Y* — [010], *Z* — [001]. Если какая-либо плоскость перпендикулярна какой-либо оси, можно записать зональное уравнение (1.13)



Так как осей в условии задачи две, таких уравнений будет два:



Для решения этой системы запишем детерминант (определитель) этой системы

.

Три минора этого детерминанта определяют индексы искомой плоскости:





**

Следовательно, индексы этой плоскости будут (100).

**Задача 1.6**

Определите индексы плоскости, проходящей через две телесные диагонали куба.

*Решение*

Выберем две телесные диагонали куба [111] и  (рис. 1.21, *а*). Запишем два зональ-ных уравнения (см. формулу (1.13)) и определитель для них:

****

****.

Три минора этого детерминанта определяют индексы искомой плоскости:







|  |  |
| --- | --- |
| К задаче 1.6а | К задаче 1.6б |
| *а* | *б* |

*Рис. 1.21.* **К задаче 1.6**

Следовательно, индексы этой плоскости будут *.*

На рис. 1.21, *б* эта задача представлена на стереографической проекции.

**Задача 1.7**

Принадлежат ли плоскости  (113) кубического кристалла к одной зоне? Определите индексы зоны.

*Решение*

Для решения задачи выберем одну из плоскостей, например плоскость , для сопо-ставления с другими плоскостями, составим определители и посчитаем миноры:

 **

 **

 **

Анализ полученных выражений показывает, что плоскости  принад-лежат к одной зоне и ось этой зоны задается индексами [111]. Плоскость (113) к этой зоне   
не принадлежит.

**Задача 2.1**

Имеется ось симметрии *n*-го порядка и плоскость симметрии, параллельная этой оси. Какие возникнут новые элементы симметрии (точечные группы) в результате взаимодействия названных элементов симметрии, если даны:

а) ось симметрии второго порядка;

б) ось симметрии третьего порядка?

*Решение*

**2.1а.** На рис. 2.15показаны стереографические проекции взаимодействия элементов симметрии.

**K:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 2\Рис. к гл.2\Рис. 2.15.tif**

*а б в*

*Рис. 2.15.* **К задаче 2.1а**

Плоскость симметрии *m*1 отображает точку 1 (элемент фигуры) в точку 1*'* (рис. 2.15, *а*). Поворотная ось второго порядка отображает точки 1 и 1*'* в точки 1*''* и 1*'* (рис. 2.15, *б*). Из   
рис. 2.15, *в* следует, что в данной геометрии имеется еще одна ось симметрии — *m*2, перпендикулярная оси *m*1 и параллельная оси второго порядка. Эта геометрия соответствует точечной группе *mm* (элементы симметрии записываются в порядке их размещения по осям координат.

**2.1б.** Рассмотрим следующий случай — плоскость симметрии и поворотная ось третьего порядка (см. рис. 2.16). Как и в предыдущем случае, плоскость симметрии *m*1 преобразует точку 1 в точку 1*'* (рис. 2.16, *а*). Поворотная ось симметрии третьего порядка образует еще пять пар точек (см. рис. 2.16, *б*). Из анализа стереографической проекции   
(рис. 2.16, *в*) становится понятно, что поворотная ось симметрии рождает еще две плоскости симметрии: *m*2 и *m*3. Эта геометрия соответствует точечной группе 3*mm*.

K:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 2\Рис. к гл.2\Рис. 2.16.tif

*а б в*

*Рис. 2.16.* **К задаче 2.1б**

Резюмируя сказанное выше, можно утверждать, что взаимодействие плоскости симметрии с осью *n*-го порядка рождает *n* плоскостей, параллельных поворотной оси.

**Задача 2.2**

В кристалле имеются три взаимно перпендикулярные плоскости симметрии. Определить полный набор элементов симметрии, кристаллическую систему, класс симметрии

*Решение*

|  |  |
| --- | --- |
| Пересечение каждой пары плоскостей симметрии порождает ось второго порядка. В геометрии, приведенной на рис. 2.17, таких пар плоскостей три. Следовательно, появляется три оси симметрии второго порядка, перпендикулярные друг к другу. Точка пересечения оси четного порядка и плоскости симметрии всегда рождает центр инверсии, т. е. . | сканирование0038-1 |
| *Рис. 2.17.* **К задаче 2.2** |

Три взаимно перпендикулярные плоскости симметрии приводят к возникновению трех взаимно перпендикулярных осей симметрии второго порядка и центра инверсии на их пересечении, т.е.  Эта геометрия соответствует точечной группе 222.

**Задача 2.3**

В кристалле имеется одна ось четвертого порядка и плоскости симметрии, перпендикулярные и параллельные этой оси (рис. 2.18, *а*). Определите весь набор элементов симметрии, систему и класс симметрии. Покажите эти элементы симметрии на стереографической проекции.

*Решение*

Две взаимно перпендикулярные плоскости симметрии образуют ось второго порядка (рис. 2.18, *б*). Ось четвертого порядка, параллельная плоскости симметрии, создает еще одну плоскость симметрии, параллельную оси четвертого порядка и перпендикулярную другим плоскостям. Эта конфигурация создает еще одну ось симметрии второго порядка, перпенди-кулярную первой (рис. 2.18, *в*).

H:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 2\Рис. к гл.2\Вера\Рис-2-19.tif

|  |  |
| --- | --- |
| *а б в г* | *д е* |

*Рис. 2.18.* **К задаче 2.3**

Стереографическая проекция всех перечисленных выше элементов симметрии представлена на рис. 2.18, *г*,из которого следует, что образованная система плоскостей и осей приводит к рождению еще двух плоскостей симметрии, параллельных оси четвертого порядка (рис. 2.18, *д*, *е*). В результате получается точечная группа симметрии *mm*.

**Задача 2.4**

(333)

(400)

Даны две плоскости зеркального отражения, параллельные друг другу и расположен-ные на расстоянии *a*. Какая симметрическая операция получится в результате взаимодействия этих двух плоскостей?

*Решение*

Изобразим на рисунке действие этих двух плоскостей (рис. 2.19).

K:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 2\Рис. к гл.2\Рис. 2.19.tif

*а б*

*Рис. 2.19.* **К задаче 2.4**

Первая плоскость *m*1 зеркально отображает объект *А* в объект *В* (рис. 2.19, *а*). Вторая плоскость *m*2 отображает объект *В* в объект *С*. Следовательно, объект *А* просто переносится параллельно самому себе на величину 2*а*. Таким образом, действие двух зеркальных плоскостей сводится к трансляции на вектор *m*1 + *m*2 = ǀ**Tǀ** = 2*a*(рис. 2.19, *б*).

**Задача 2.5**

(333)

(400)

Задана зеркальная плоскость симметрии и перпендикулярный к ней трансляционный перенос на вектор **T**. Определите новые элементы симметрии, получающиеся в результате взаимодействия отражения от плоскости и трансляции.

*Решение*

На рис. 2.20представлено действие указанных элементов симметрии.

E:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 2\Рис.2.22..tif

*Рис. 2.20.* **К задаче 2.5**

Из рис. 2.20 следует, что плоскость симметрии и перпендикулярная к ней трансляция порождают одноименную вставленную зеркальную плоскость *m*2, т. е. *m*1 + **T** = *m*2.

**Задача 2.6**

Определите тип обратной решетки Браве, если прямая решетка — гранецентрирован-ная кубическаярешетка.

*Решение*

1. Искомая обратная решетка будет прямоугольная, т. е. кубическая, так как по определению



Следовательно:

* вектор **a\*** перпендикулярен плоскости, в которой лежат векторы **b** и **c**, так как 
* вектор **b**\* перпендикулярен плоскости, в которой лежат векторы **a** и **c,** так как 
* вектор **c**\* перпендикулярен плоскости, в которой лежат векторы **a** и **b,** так как 

2.Для определения типа этой кубической решетки необходимо определить величины нескольких межплоскостных расстояний. Рассмотрим несколько характерных типов плоскостей в прямой решетке. Определим для них межплоскостные расстояния и найдем векторы обратной решетки для этих систем плоскостей.

2.1. Рассмотрим плоскости типа (100), (010), (001) (рис. 2.21, *а*). Межплоскостные расстояния определяются по формуле (1.9)



и соответственно равны:

.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| H:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 2\Рис. к гл.2\Рис-2-24a.tif | | H:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 2\Рис. к гл.2\Рис-2-24б.tif | | H:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 2\Рис. к гл.2\Рис-2-24в.tif |
| *а* | | *б* | | *в* |
| E:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 2\Рис. к главе 2\Fig-Fin\Рис. 2.21г.tif | | H:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 2\Рис. к гл.2\Рис. 2.21д.tif | |
| *г* | | *д* | |

*Рис. 2.21.* **К задаче 2.6**

Модуль вектора обратной решетки для плоскостей этого типа будет



Следовательно, базисные векторы обратной решетки



2.2. Рассмотрим далее совокупности плоскостей[[1]](#footnote-1) типа {110} (см. рис. 2.21, *б*). Меж-плоскостное расстояние для них определяется по формуле (1.9)



Вектор обратной решетки **H**110 ориентирован вдоль диагонали основания элементарной ячейки обратной решетки:



2.3. Рассмотрим совокупность плоскостей типа {111} (см. рис. 2.21, *в*). Межплоскост-ные расстояния определяются по формуле (1.9)



Следовательно, модуль вектора обратной решетки



Этот вектор перпендикулярен плоскостям типа {111} и направлен вдоль телесной диагонали элементарной ячейки обратной решетки.

3. Длину пространственной диагонали *D*111 элементарной ячейки обратной решетки определить легко, если известны длины базисных векторов (см. рис. 2.21, *г*):

******

Однако длина вектора обратной решетки ǀ**H**111ǀ, найденная выше, составляет половину телесной диагонали *D*111 (см. рис. 2.21, *д*). Это означает, что обратная решетка для гранецентрированной решетки будет объемноцентрированная решетка.

**Задача 3.1**

На узкую щель шириной *a* падает плоская волна. Рассчитайте распределение излучения (дифракционную картину) за этой щелью.

*Решение*

Дифракционная картина — это Фурье-образ объекта. Если объект описывается функцией *f*(*x*), то Фурье-образ объекта (дифракционная картина) определяется интегралом Фурье (см. формулу (3.1)) от этой функции, т. е.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.80)  Щель — это функция типа |

Фурье-образ такой функции будет описываться интегралом:

 (3.81)

Это табличный интеграл типа



Тогда Фурье-образ щели можно записать в виде

 (3.82)

Используя формулы Эйлера (см. прил. 5, табл. П.5.3), преобразуем интеграл (3.82)   
к виду



D:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 3\Рис. к гл.3\Рис.Fin. к гл.3\Fin 100\Рис. 3.41.tif

*Рис. 3.39.* **К задаче 3.1**

Таким образом, дифракционная картина от щели (Фурье-образ) будет иметь вид, приведенный на рис. 3.39.

**Задача 3.2**

|  |  |
| --- | --- |
| Рассчитайте результирующее волновое поле, формируемое в точке *M* в результате сложения двух сферических когерентных волн, распространяющихся из точек *A*1 и *A*2.  *Решение* | E:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 3\Рис. к гл.3\Рис.Fin. к гл.3\Fin 100\Рис. к задаче 3.2.tif |

Положим, что амплитуды рассеянных волн, распространяющихся из точек *A*1 и *A*2, имеют вид соответственно





Здесь *E*01 и *E*02 — амплитуды падающих волн; *r*1 и *r*2 — расстояния от точек *A*1 и *A*2 до точки *M*; ω — частота волн; *t* — текущее время; *k* = 2π/λ — волновое число.

Если волны когерентны, то разность фаз волн в точке *M* будет

 (3.83)

Сумму двух волн в точке *M* можно записать в виде

 (3.84)

где

 (3.85)



Подставив значение ϕ из формулы (3.83) в выражение (3.85), получим



Амплитуда результирующей волны *Е* будет максимальна во всех точках *M* при   
cos *k* (*r*2 – *r*1) = 1, если



где *m* = 0, ±1, ±2, …

Минимальная амплитуда волны будет во всех точках *M*, если



где *m* = 0, ±1, ±2, …

**Задача 3.3**

(333)

(400)

Определите вид волнового поля, образованного в результате дифракции плоской волны на бесконечной дифракционной решетке.

*Решение*

Для получения простого и понятного решения несколько упростим условие задачи.   
Будем считать, что амплитуда щелей дифракционной решетки имеет бесконечную величину при бесконечно малой ширине щелей. Тогда такая дифракционная решетка будет описываться функцией



где *N* — число щелей решетки; *a* — расстояние между соседними щелями.

|  |  |
| --- | --- |
| D:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 3\Рис. к гл.3\Рис. к задаче 3.3.tif | Мы знаем, что Фурье-образ функции δ(*х* – *а*) равняется exp (2π*iua*). Поэтому функция, описывающая дифракционную картину на такой решетке, будет иметь вид  (3.86) |

Суммирование этого ряда проще проводить, если ряд начинается с нулевого члена.   
В этом случае сумма ряда определяется соотношением

 (3.87)

После подстановки в (3.87) значения показателя экспоненты из (3.86) последнее принимает вид

 (3.88)

Формула (3.88) — обычная геометрическая прогрессия, где первый член *a*1 = 1, знаменатель прогрессии *q* = exp (2π*iua*), сумма



В результате суммирования членов геометрической прогрессии получим



Тогда Фурье-образ дифракционной решетки (дифракционная картина) (3.88) примет вид

 (3.89)

После несложных преобразований выражение (3.89) примет вид



В окончательном виде выражение (3.89) волнового поля после дифракционной решетки записывается как



т. е.

 (3.90)

Выражение (3.90) — это известная функция Лауэ для дифракции на одномерной решетке. На рис. 3.16 приведены четыре графика функции Лауэ для четырех значений количества щелей *N* дифракционной решетки. Из рис. 3.16 следует, что с увеличением количества щелей дифракционные рефлексы сужаются, амплитуда их возрастает, величина побочных максимумов уменьшается.

**Задача 3.4**

Какая решетка получится, если в кубической решетке центрировать грани решетки и объем?

*Решение*

Рассмотрим две кубические решетки: решетку со всеми центрированными гранями (рис. 3.40, *а*) и решетку с центрированным объемом (рис.3.40, *б*).

D:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 3\Рис. к гл.3\Рис.Fin. к гл.3\Fin 100\Куб.реш\Рис. 3.40а.tif

*а б*

*Рис. 3.40.* **К задаче 3.4**

Так как расстояние от узла, находящегося в центре куба, до узла, находящегося в центре граней, равно *a/*2, где *a* — сторона куба, период идентичности уменьшается вдвое и в результате мы приходим к примитивной решетке с периодом *a/*2.

**Задача 3.5**

Определите плотность кристалла меди, имеющего кубическую решетку с базисом  
[[000, ½ ½ 0; ½ 0 ½; 0 ½ ½]]. Параметр элементарной ячейки кристалла меди *a* = 3,61 Å, масса атома меди *m*Cu = *Am*H = 63,57 ∙ 1,65 ∙ 10–24 г (здесь *A* — атомный вес[[2]](#footnote-2) меди, *m*H — масса атома водорода).

*Решение*

По определению плотность вещества

 (3.91)

где *M* — масса вещества; *V* — занимаемый объем.

Применяя формулу (3.91) к элементарной ячейке, получаем

 (3.92)

Здесь *N* — число атомов в элементарной ячейке; *P* — масса атома; *V* — объем ячейки.

Для кристалла меди получаем



что совпадает с табличным значением плотности меди, определяемым обычным методом взвешивания.

**Задача 3.6**

Определите число атомов в элементарной ячейке железа, кристаллизующегося в кубической системе. Ребро куба *а* = 2,87 Å; атомный вес железа — 55,84 а. е. м.; плотность железа ρ = 7,8 г/см3;

*Решение*

Применяя формулу плотности (3.92) к элементарной ячейке, находим



где *A* — атомный вес; *m*H — масса атома водорода;



Таким образом, на элементарную ячейку приходится два атома. Это означает, что рассматриваемая кубическая решетка является объемноцентрированной.

**Задача 3.7**

Определите коротковолновую границу тормозного спектра рентгеновского излучения для ускоряющего напряжения 20, 40 и 60 кВ.

*Решение*

Коротковолновая граница рентгеновского тормозного спектра возникает, когда энергия ускоренного электрона полностью переходит за счет торможения в мишени анода в энергию рентгеновского кванта. Это означает, что (см. формулу (3.4))

|  |  |
| --- | --- |
| K:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 3\Рис. к гл.3\Рис.Fin. к гл.3\Рис. 3.45.tif | (3.93)  где *e* — заряд электрона; *U* — ускоряющее напряжение, В; *h* — постоянная Планка; *c* — скорость света; λmin — длина волны, Å; νmax *—* частотаэлектромагнитной волны.  Подставив в выражение (3.93) все необходимые константы, получим  (3.94) |
| *Рис. 3.41.* **К задаче 3.7** |

Расчеты дают следующие величины коротковолновой границы (рис. 3.41):

при *U* = 20 кВ λ = 0,620 Å;

при *U* = 40 кВ λ = 0,309 Å;

при *U* = 60 кВ λ = 0,206 Å.

**Задача 3.8**

Определите величину ускоряющего напряжения, начиная с которого разница длин волн с учетом и без учета релятивистской поправки будет составлять 15 %.

*Решение*

Запишем формулы, определяющие классическую и релятивистскую длины волн в зависимости от ускоряющего напряжения:

После подстановки численных значений констант *h*, *m*, *e*, *c*, получим

|  |  |
| --- | --- |
| K:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 3\Рис. к гл.3\Рис.Fin. к гл.3\Рис-3-42.tif | Найдем разницу этих длин волн в процентах:    Разница длин волн будет составлять 15 % при ускоряющем напряжении 180 кВ (расчет опускаем).  График полученной зависимости приведен на рис. 3.42. |
| *Рис. 3.42.* **К задаче 3.8** |

**Задача 3.9**

|  |  |
| --- | --- |
| Определите структурную амплитуду для кубической решетки, центрированной по одному ребру.  *Решение*  Базис такой решетки — [[000, 1/200]]. Структурная амплитуда в общем случае имеет вид (3.40) | I:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 3\Рис. к гл.3\Рис. к задаче 3.9.tif |

Воспользовавшись формулами Эйлера (см. табл. П.5.3), выражение (3.40)можно записать в виде

 (3.95)

Вся мнимая часть суммы равна нулю, так как



Поэтому выражение (3.95) примет вид

 (3.96)

Подставляя координаты базиса в формулу (3.96) и полагая, что все атомы в решетке одинаковы, т. е. *f* = *f*1 = *f*2, получаем

 (3.97)

Так как



структурная амплитуда для такой решетки определяется выражением



Правила погасаний рефлексов представлены в табл. 3.3.

**Верстальщику. Поставьте, пожалуйста, вторую вертикальную черту после первого столбца *I* — стык двух частей табл. 3.3.**

*Таблица 3.3*

**Правила погасаний рефлексов (к задаче 3.9)**

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| ***h*2 + *k*2+ *l*2** | ***hkl*** | ***I*** | ***h*2+ *k*2+ *l*2** | ***hkl*** | ***I*** |
| 1 | 100 | 0 | 6 | 211 | 2*f* |
| 2 | 110 | 0 | 7 | — | — |
| 3 | 111 | 0 | 8 | 220 | 2*f* |
| 4 | 200 | 2*f* | 9 | 300, 221 | 0, 2*f* |
| 5 | 210 | 2*f* | 10 | 310 | 0 |

**Задача 3.10**

|  |  |
| --- | --- |
| Определите структурную амплитуду для кубической решетки, центрированной по одной грани. Базис такой решетки — [[000, ½ ½ 0]].  *Решение*  Формулу для структурной амплитуды запишем в виде (3.95) | **D:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 3\Рис. к гл.3\Рис.Fin. к гл.3\Fin 100\Куб.реш\ЦГ.tif** |

 (3.98)

Мнимая часть сумм для базиса рассматриваемой решетки равна нулю, так как



Базис состоит из двух атомов, следовательно, сумма в структурной амплитуде будет иметь два слагаемых. Положим, что все атомы одинаковые, т. е *f*1 *= f*2 *= f*. Тогда выражение для структурной амплитуды (3.98) примет вид

 (3.99)

Анализ выражения (3.99) дает следующие правила погасаний:



**Задача 3.11**

Определите структурную амплитуду гранецентрированной кубической решетки. Базис решетки — [[000, ½ ½ 0, ½ 0½, 0½ ½,]].

|  |  |
| --- | --- |
| *Решение*  Формулу для структурной амплитуды запишем в виде (3.95)  Если считать, что все атомы в решетке одинаковые и воспользоваться формулами Эйлера, тогда для ГЦК-решетки выражение для | **D:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 3\Рис. к гл.3\Рис.Fin. к гл.3\Fin 100\Куб.реш\ГЦК.tif** |

структурной амплитуды (3.95) примет вид



 (3.100)

Мнимая часть равна нулю, так как



Тогда выражение (3.100) можно переписать как



 (3.101)

Анализ формулы (3.101) показывает, что



Следовательно, правило погасаний для ГЦК-решетки будет иметь вид



**Задача 3.12**

Определите структурную амплитуду для объемно-центрированной кубической решетки. Базис ОЦК-решетки содержит два атома и имеет вид [[000, ½ ½ ½]].

*Решение*

Формулу для структурной амплитуды запишем в виде (3.95)



|  |  |
| --- | --- |
| D:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 3\Рис. к гл.3\Рис.Fin. к гл.3\Fin 100\Куб.реш\ОЦК.tif | Мнимые члены суммы будут отсутствовать, так как    Следовательно, окончательное выражение для структурной амплитуды ОЦК-решетки имеет вид  (3.102) |

Анализ выражения (3.102) показывает, что



Следовательно, структурная амплитуда для ОЦК-решетки будет иметь только два значения:



**Задача 3.13**

|  |  |
| --- | --- |
| Рассчитайте структурную амплитуду, структурный фактор и определите законы погасаний для решетки алмаза.  *Решение*  Решетка алмаза — это две гранецентрированные решетки, сдвинутые по телесной диагонали на 1/4 ее длины. Пространственная группа имеет вид *Fd*3*m.* | [Картинки по запросу кристаллическая решетка алмаза](http://bse.sci-lib.com/particle013630.html) |

Базис решетки алмаза (координаты атомов внутри элементарной ячейки)

[[000; 1/2,1/2, 0; 1/2, 0, 1/2; 0, 1/2, 1/2; 1/4, 1/4, 1/4; 3/4, 3/4, 1/4; 3/4, 1/4, 3/4; 1/4, 3/4, 3/4]]

содержит восемь атомов в элементарной ячейке.

Формулу для структурной амплитуды запишем в виде (3.40)



Воспользуемся формулами Эйлера (см. прил. 5, табл. П.5.3) и преобразуем это выражение к виду

 (3.103)

Структурная амплитуда будет иметь по восемь слагаемых в каждой сумме. Непосредственный расчет структурной амплитуды по формуле (3.103) довольно громоздок.

Для структур, состоящих из двух одинаковых элементарных ячеек, вставленных одна   
в другую с некоторым сдвигом, в структурном анализе доказывается теорема

 (3.104)

где *F*1(*hkl*) — структурная амплитуда исходной решетки; exp[2π*i*(**H, r**)] — фазовый сдвиг между решетками.

Преобразуем выражение (3.104) к виду

 (3.105)

Здесь *F*1 — структурная амплитуда исходной решетки; *F*2 — формула, учитывающая фазовый сдвиг между решетками на 1/4 телесной диагонали.

Подставив в выражение (3.105) численные значения координат атомов базиса и величину сдвига *r* =1/4, получим

 (3.106)

Преобразуем выражение (3.106), используя формулы Эйлера (см. прил. 5, табл. П.5.3):





Мнимая часть слагаемых будет равна нулю, так как







т. е.



Оставшаяся часть слагаемых структурной амплитуды для гранецентрированной решетки будет равна нулю, если индексы плоскости (*hkl*) смешанной четности:







Поэтому правило погасаний множителя *F*1 можно записать в виде



Далее необходимо исследовать поведение функции *F*2, отвечающей за сдвиг решеток:



Если *h* + *k* + *l* = 2 ∙ (2*n* + 1), то



и, соответственно, *F*2 = 0.

Если *h* + *k* + *l* = 2*n* + 1, то



и, следовательно, *F*2 = 1.

Наконец, если *h* + *k* + *l* = 2*n*, то



и *F*2 = 2.

Поэтому для решетки алмаза обнуление структурной амплитуды (правила погасаний рефлексов) будут определяться двумя условиями, а именно структурная амплитуда будет равна нулю:

1) если индексы плоскости (*hkl*) смешанной четности;

2) если



Таким образом, структурная амплитуда решетки алмаза *F*(*hkl*) = *F*1*F*2 = 0, если:

1) *h*, *k*, *l* смешанной четности;

2) *h + k + l* = 4*n* + 2,

т.е. для рефлексов (100); (110); (210); (410); (600) и т. д. Следовательно, на рентгенограмме для структуры алмаза будут присутствовать рефлексы типа (111); (220); (311); (400); (331); (422); (511); (440); (531); (620); (533) и т. д.

**Задача 3.14**

Найдите связь между линейным, атомным и массовым коэффициентами поглощения для рентгеновского излучения.

*Решение*

Рассмотрим столбик вещества, через который проходит рентгеновский пучок. Этот столбик имеет сечение *s* = 1 см2и длину *x* (см). Пусть *N* — количество атомов вещества, лежащего на пути пучка, а *P* — количество граммов вещества. Следовательно, можно написать

** (3.107)

где ρ — плотность вещества. Тогда из равенства(3.107) следует



Запишем соотношение (3.107) в виде

** (3.108)

где *N* — число атомов на пути рентгеновского пучка в столбике *xs* — равно числу молей в нем, умноженному на число атомов в 1 моле (т. е. на число Авагадро *N*A= 6,022 141 29(27) × ×1023 моль−1).

Если *M* — атомный или молекулярный вес, то можно записать



Тогда из равенства (3.108) получим



**Задача 4.1**

Определите экстинкционную длину для отражения (220) монокристалла кремния (для излучений и ).

Параметр решетки для кремния *а* = 5,4306 Å, длины волн соответствующих излуче-  
ний — = 0,70926 Å, = 1,54051 Å. Фурье-компонента поляризуемости для плоскостей типа (220):

* для Mo*K*α-излучения χ(220) = (2,04 + *i*0,017) ∙ 10–6;
* для Cu*K*α-излучения χ(220) = (9,74 + *i*0,340) ∙ 10–6.

*Решение*

Экстинкционная длина — это толщина кристалла, на которой происходит полная передача энергии от нормальной волны к аномальной и обратно за счет маятникового эффекта. Величина экстинкционной длины определяется соотношением (4.15)



Здесь величина |∆**K**| — минимальное расстояние между ветвями дисперсионной поверхности в точном положении Брэгга. Параметры и — Фурье-компоненты поляризуемости монокристалла для плоскостей (*hkl*) и соответствующего излучения. Если кристалл центросимметричный, то  Параметр *С* — фактор поляризации.

Положим для простоты расчетов *С* = 1. Для кубического кристалла межплоскостное расстояние *d* определяется квадратичной формой (1.9)



Таким образом, для вычисления экстинкционной длины необходимо определить величину cos θ для отражения от плоскостей с индексами (*hkl*):



Для Mo*K*α-излучения



и, следовательно, экстинкционная длина



Для Cu*K*α-излучения



и, соответственно, экстинкционная длина



**Задача 4.2**

Определите количество экстинкционных полос, которое будет наблюдаться на топограмме кристалла кремния с клиновидным срезом на краю (рис. 4.12). Толщина кристалла — 450 мкм, поверхность кристалла перпендикулярна вектору [111], топограмма снята на отражении  перпендикулярном поверхности кристалла на излучении    
(λ = 0,70926 Å). Фурье-компонента поляризуемости кристалла для этого случая =   
= (2,04 + *i*0,017) ∙ 10–6. Параметр решетки для кремния *а* = 5,4306 Å.

*Решение*

|  |  |
| --- | --- |
| Количество экстинкционных полос определяется отношением толщины кристалла *t* к величине экстинк-ционной длины Λ:    Экстинкционная длина определяется по формуле (4.15) | **D:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 4\Рис. 4.12.tif** |
| *Рис. 4.12.* **Геометрия кристалла** |



Подставляя в формулу (4.15) соответствующие константы, получаем







**Задача 5.1**

Определите индексы Миллера первых шести линий на рентгенограмме поликристалла алюминия Al, представленной на рис. 5.61.

*Решение*

Алюминий имеет гранецентрированную кубическую решетку. Правило погасаний рефлексов выражается формулой (см. задачу 3.19)

 (5.24)

N:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 5\FinRis\Рис. 5.2\Рис. 5.61.tif

*Рис. 5.61.* **Рентгенограмма поликристалла алюминия**

Следовательно, на дебаеграмме будут наблюдаться рефлексы (111), (200), (220), (222), (311), (331), (333), (400).

**Задача 5.2**

Образец кремния имеет форму параллелепипеда с гранями (111), (110), (112), как показано на рис. 5.62, *б*.

|  |  |
| --- | --- |
| D:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 5\FinRis\Рис. 5.62.tif | K:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 5\FinRis\Рис. 5.62б.tif |

*а б*

*Рис. 5.62.* **К задаче 5.2**

Винтовые прямолинейные дислокации располагаются в образце в плоскости скольжения вдоль направления [011]. Определите, какое отражение необходимо использовать, чтобы на топограмме были видны эти дислокации наиболее контрастно. Какой при этом будет дифракционный угол на излучении  Длина волны = 0,70926 Å, параметр элементарной ячейки кремния *а* = 5,4306 Å.

*Решение*

Если винтовая дислокация располагается вдоль направления [011] (красная линия на   
рис. 5.62, *а*) в плоскости скольжения  наиболее контрастное ее изображение будет формироваться при отражении от плоскости (022), так как именно эта плоскость будет наиболее искажена упругим полем винтовой дислокации. Поэтому следует получить топограмму отражением от плоскости (022).

Дифракционный угол определяется по формуле Вульфа — Брэгга (3.32)



Отсюда дифракционный угол определяется соотношением

 (5.25)

Подставив в выражение (5.25) значение межплоскостного расстояния (1.9),



индексы плоскости и параметр решетки *a*, получим значение sin θ и, следовательно, величину брэгговского угла





**Задача 5.3**

На рентгеновской топограмме кристалла с поверхностью (111), полученной по методу Ланга, наблюдаются прямолинейные дислокации. Они лежат в плоскости  вдоль направления  Изображение гаснет при отражении от системы плоскостей  Определите тип этих дислокаций.

*Решение*

Общее правило рентгеновской топографии приведено на рис. 5.54.

Погасание контраста происходит в случае, если скалярное произведение вектора дифракции на вектор Бюргерса равно нулю (см. подпараграф 5.4.2.2):

 (5.26)

Подставив в соотношение (5.26) координаты вектора дифракции:



можно определить возможные координаты вектора Бюргерса:



Тогда



Следовательно, возможный тип дислокаций — это винтовые дислокации (см. рис. 5.62, *а*).

|  |  |
| --- | --- |
| **Задача 5.4**  Рассчитайте необходимую ширину щели коллиматора для выделения -линии в методе Ланга. Исследуемый кристалл — кремний; параметр элементарной ячейки кремния *а* = 5,4306 Å; отражение | K:\ЮРАЙТ 2\Корректура\Глава 5\FinRis\Рис. к задаче 5.4.tif |

(220); расстояние от источника до выходной щели коллиматора — 450 мм; источник точечный. Длины волн: = 0,70926 Å; = 0,71354 Å.

*Решение*

Ширина щели, формирующая пучок, определяет величину расходимости пучка, падающего на кристалл. Для того чтобы исследуемый кристалл отражал только одну длину волны  необходимо, чтобы угловая ширина падающего на кристалл пучка была меньше углового интервала между отражениями и 

Запишем условия Брэгга (3.32) для этих длин волн:





Отсюда легко найти разницу между угловыми положениями θ1 и θ2:







Следовательно, угловая ширина щели



линейная ширина щели

 (5.27)

Определив значение тангенса угла Брэгга:



и подставив его в выражение линейной ширины щели (5.27), получим



**Задача 5.5**

Оцените пространственное разрешение на рентгеновской топограмме монокристалла кремния, снятой по методу Ланга. Излучение (λ = 0,70926 Å), расстояние от образца до фотопластинки *l* = 10 мм, размеры фокуса рентгеновского источника Δ*x* = 30 мкм, расстояние от источника до щели *L* = 450 мм, используемое отражение (220), экстинкционная длина для кремния Λ220 = 31,44 мкм.

*Решение*

Линейное разрешение в методе Ланга (см.подпараграф 5.4.2.2)складывается из трех факторов:

1) дифракционное уширением рефлексов, определяемое величиной брэгговского угла рассеяния и экстинкционной длиной;

2) геометрическое уширение, определяемое размерами фокального пятна рентгеновской трубки и геометрической схемой эксперимента;

3) спектральное размытие изображения, связанное с шириной используемого спектра рентгеновского излучения.

Величина полного уширения точки на топограмме (разрешение) (см. формулу (5.20))



Подставив заданные в условиях задачи параметры, получим:

1) дифракционное уширение деталей изображения на топограмме



2) геометрическое уширение



3) спектральное уширение







Просуммировав три полученные компоненты, получим оценку линейного разрешения метода Ланга:



**Задача 5.6**

Какой контраст (экстинкционный или бормановский) будет наблюдаться на топограмме монокристалла кремния толщиной 900 мкм на отражении (220) на излучении:    
и  Соответствующие компоненты коэффициентов поляризуемости χ0*i* = 0,0162   
и χ0*i* = 0,351.

*Решение*

Критерием для определения, является ли контраст бормановским или экстинкционным, является условие



В соответствии с теорией Максвелла в качестве коэффициента поглощения используют величину фотоэлектрического поглощения



Численные оценки дают следующее:

1) для излучения получаем



Такой контраст считают еще экстинкционным, но на грани;

2) для излучения получаем



Это бормановский контраст.

1. В кристаллографии принято обозначать всю совокупность однотипных плоскостей индексами Миллера в фигурных скобках. [↑](#footnote-ref-1)
2. Атомный вес (атомная масса) — это число, показывающее, во сколько раз масса атома данного химического элемента больше международной единицы атомной массы (а. е. м.), т. е. 1/12 массы атома изотопа углерода 12С (1 а. е. м. = 1,660 540 2(10) ⋅ 10−27 [кг](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9A%D0%B8%D0%BB%D0%BE%D0%B3%D1%80%D0%B0%D0%BC%D0%BC) = 1,660 540 2(10) ⋅ 10−24 [г](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%93%D1%80%D0%B0%D0%BC%D0%BC)), находящегося в основном состоянии. [↑](#footnote-ref-2)