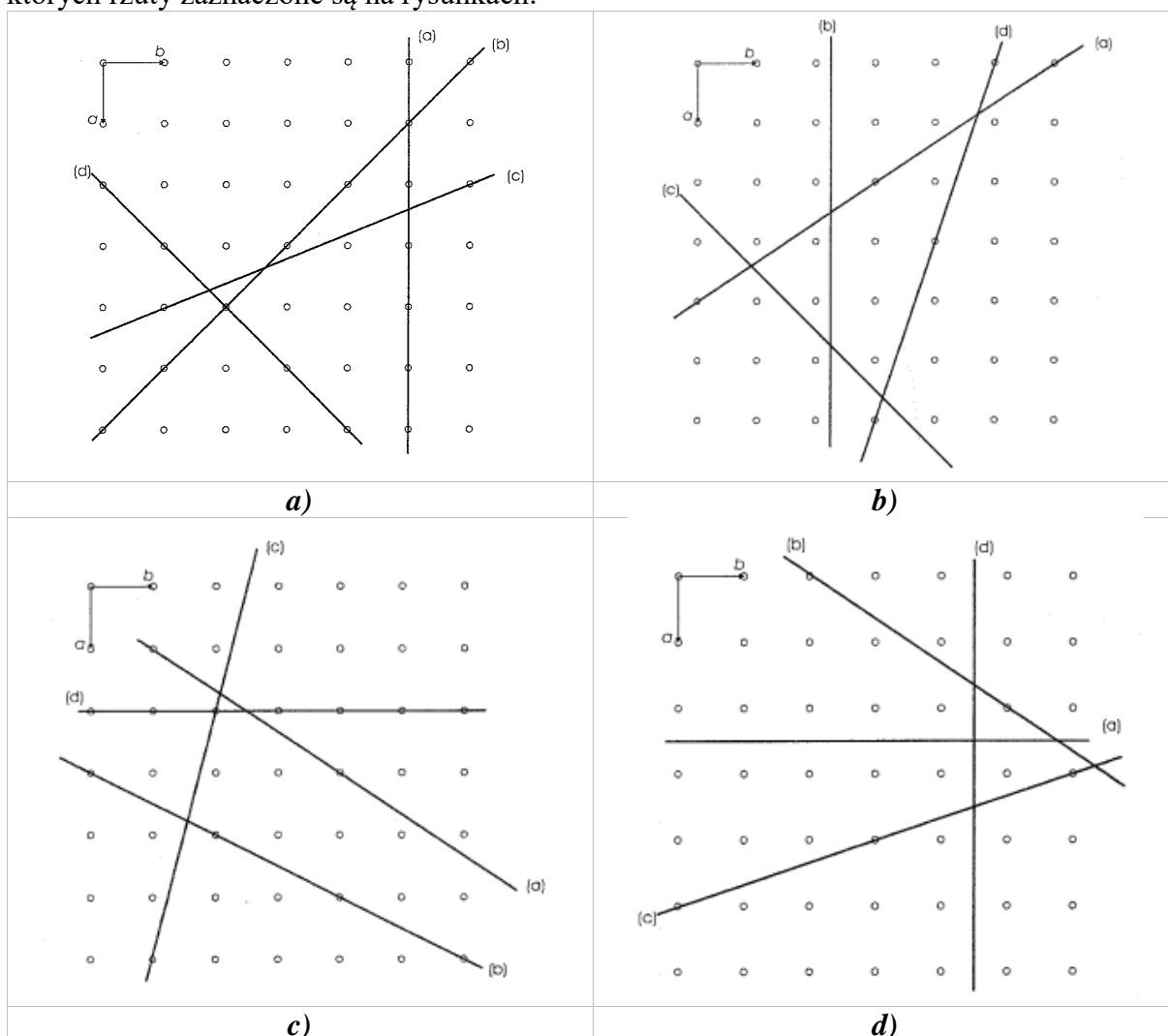


6 ROZPRASZANIE NA STRUKTURACH KRystalicznych

Zadanie 6.1

Znaleźć współczynniki Millera płaszczyzn sieciowych prostopadłych do płaszczyzny rysunku, których rzuty zaznaczone są na rysunkach:



Zadanie 6.2

Zaznacz w przypadku sieci regularnej następujące płaszczyzny $(0\ 0\ 1)$, $(1\ 0\ 1)$, $(0\ 1\ 1)$, $(0\ 2\ 1)$, $(2\ 1\ 0)$, $(2\ 1\ 1)$ i $(1\ 2\ 2)$.

Zadanie 6.3

Narysować płaszczyzny typu $(h\ 0\ 0)$, $(h\ h\ 0)$ i $(h\ h\ h)$ o najmniejszych wartościach wskaźników h , występujące w sieciach **a)** regularnej, **b)** regularnej przestrzennie centrowanej, **c)** regularnej powierzchniowo centrowanej.

Zadanie 6.4

Znajdź płaszczyzny najgęstsze upakowania w przypadku sieci **a)** regularnej, **b)** regularnej przestrzennie centrowanej, **c)** regularnej powierzchniowo centrowanej.

Zadanie 6.5

Pewna sieć trójwymiarowa ma wektory bazy: $\mathbf{a} = 3\mathbf{x}$, $\mathbf{b} = 3\mathbf{y}$ i $\mathbf{c} = 1,5(\mathbf{x} + \mathbf{y} + \mathbf{z})$. Podaj wskaźniki Millera płaszczyzn o najgęstszym upakowaniu.

Zadanie 6.6

Wyprowadzić wzór Bragga w przypadku dwóch płaszczyzn odległych od siebie o odległość d .

Zadanie 6.7

Udowodnić, że równanie Lauego są równoważne równaniu Bragga.

Zadanie 6.8

Nikiel krystalizuje w strukturze regularnej powierzchniowo centrowanej o parametrze sieci $a = 3,52 \text{ \AA}$. Określić kąty ugięcia wiązki promieniowania X o długości fali $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$ od płaszczyzn $(1\ 0\ 0)$, $(1\ 1\ 1)$, $(2\ 0\ 0)$ i $(2\ 2\ 0)$.

Zadanie 6.9

Tantal krystalizuje w strukturze regularnej przestrzennie centrowanej o parametrze sieci $a = 0,3303 \text{ nm}$. Określić kąty ugięcia wiązki promieniowania X o długości fali $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$ od płaszczyzn $(1\ 1\ 0)$, $(2\ 1\ 1)$, $(3\ 1\ 0)$.

Zadanie 6.10

O ile zmieni się (wraz ze zmianą temperatury o 1 K) parametr sieci miedzi wiedząc, że w temperaturze 293 K jeden z refleksów obserwuje się pod kątem $47,75^\circ$, natomiast w temperaturze 1273 K pod kątem $46,6^\circ$? Miedź krystalizuje w strukturze regularnej powierzchniowo centrowanej.

Zadanie 6.11

Próbka wykonana z mosiądzu (stop miedzi i cynku), badana przy użyciu wiązki promieniowania X o długości fali $0,229 \text{ nm}$, daje refleksy od poszczególnych płaszczyzn pod kątami: $(1\ 0\ 0) \theta = 22,9^\circ$, $(1\ 1\ 0) \theta = 33,35^\circ$, $(1\ 1\ 1) \theta = 42,35^\circ$. Obliczyć parametr sieci mosiądzu.

Zadanie 6.12

Badając spinel CuAl_2O_4 użyto promieniowania X o długości fali $0,1541 \text{ nm}$. Otrzymano refleksy od poszczególnych płaszczyzn pod kątami: $(1\ 1\ 1) \theta = 9,51^\circ$, $(2\ 0\ 0) \theta = 11^\circ$, $(2\ 2\ 0) \theta = 15,65^\circ$. Obliczyć parametr sieci spinelu.

Zadanie 6.13

Monochromatyczne promieniowanie rentgenowskie o $\lambda = 0,709 \text{ \AA}$ padając na kryształ litu (sieć regularna przestrzennie centrowana) daje od płaszczyzny $(1\ 1\ 0)$ refleks piątego rzędu pod kątem $\theta = \pi/4$. Policzyc gęstość litu. Masa atomowa litu wynosi $6,94 \text{ u}$ a jednostka masy atomowej $u = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$.

Zadanie 6.14

Monochromatyczne promieniowanie rentgenowskie o $\lambda = 0,709 \text{ \AA}$ padając na kryształ litu (sieć regularna przestrzennie centrowana) daje od płaszczyzny $(1\ 1\ 0)$ refleks piątego rzędu pod kątem $\theta = \pi/4$. Gęstość litu wynosi 520 kg/m^3 , ciężar atomowy $6,94 \text{ u}$. Korzystając z powyższych informacji wyznaczyć liczbę Avogadra N_A .

Zadanie 6.15

W przypadku kryształu CaF_2 pierwszy refleks dyfrakcyjny dla promieniowania K_α wysyłanego przez atomy miedzi (λ) obserwowany jest pod kątem θ . Gęstość CaF_2 wynosi ρ a masa atomowa Ca i F odpowiednio M_{Ca} , i M_{F} . Korzystając z powyższych informacji wyznaczyć liczbę Avogadra N_A .

Wskazówki:

1) CaF_2 jest kryształem mającym strukturę zbliżoną do struktury diamentu. Atomy Ca zajmują wierzchołki i środki ścian komórki elementarnej sieci regularnej powierzchniowo centrowanej. Atomy F znajdują się w środkach ośmiu jednakowych sześciątów, na które można podzielić sześcienną komórkę elementarną. W ten sposób na jedną komórkę elementarną przypadają 4 atomy Ca oraz 8 atomów F.

2) Geometryczny czynnik struktury dla kryształu CaF_2 redukuje się do postaci:

$$F(h\ k\ l) = \begin{cases} 4f_{\text{Ca}} & \text{dla } h, k, l \text{ - nieparzystych} \\ 4f_{\text{Ca}} - 8f_{\text{F}} & \text{dla } h+k+l = 2(2m \pm 1); h, k, l \text{ - parzyste} \\ 4f_{\text{Ca}} + 8f_{\text{F}} & \text{dla } h+k+l = 2(2m); h, k, l \text{ - parzyste} \\ 0 & \text{dla pozostałych wartości } h, k, l \end{cases}$$

Zadanie 6.16

Udowodnić, że w przypadku badania układów o odległościach między płaszczyznami rzędu 1 \AA nie można użyć światła widzialnego ($10 \text{ nm} - 1 \text{ mm}$).

Zadanie 6.17

Strukturę krystaliczną bada się przy pomocy dyfrakcji fotonów, neutronów, a rzadziej elektronów. Jakiego zakresu energii fotonów, neutronów i elektronów należy użyć by zbadać strukturę kryształu ($0,1 \text{ \AA} - 10 \text{ \AA}$)?

Zadanie 6.18

Jaka maksymalna ilość refleksów pierwszego rzędu może pojawić się w rentgenogramie kryształu o sieci regularnej prostej, o parametrze sieci $a = 2,86 \text{ \AA}$, jeżeli badania prowadzone są za pomocą promieniowania lampy kobaltowej o długości fali $\lambda = 1,789 \text{ \AA}$? Podaj typy płaszczyzn, którym te refleksy odpowiadają. Dla których płaszczyzn występują refleksy drugiego i trzeciego rzędu?

Zadanie 6.19

W metodzie Lauego bada się ugięcie polichromatycznego promieniowania rentgenowskiego na płaszczyznach nieruchomego kryształu. W trakcie badania kąt padania promieni na płaszczyznę jest wielkością stałą. Rozważając sieć regularną prostą o parametrze sieci a i wiedząc, że kierunkiem padania promieni jest kierunek $[1\ 0\ 0]$ znaleźć, korzystając z konstrukcji Ewalda, płaszczyzny typu $(h\ k\ 0)$, od których obserwuje się refleksy, jeżeli $1/3 a \leq \lambda \leq 2/3 a$.

Zadanie 6.20

Wyznaczyć widmo dyfrakcyjne dla KCl o parametrze sieci $a = 6,29 \text{ \AA}$ badanego za pomocą promieniowania K_α z lampy miedzianej ($\lambda = 1,54 \text{ \AA}$) przy założeniu rozkładu gęstości elektronów $(Q/8 \pi a^3) \exp(-r/a)$.

Zadanie 6.21

Dyfrakcja promieniowania Rentgenowskiego w sformułowaniu Lauego. Znaleźć warunek na wzmocnienie interferencyjne w przypadku dwóch centrów rozpraszania przesuniętych względem siebie o wektor \mathbf{d} . Na układ pada promieniowanie o kierunku \mathbf{n} i wektorze falowym $\mathbf{k} = 2\pi\mathbf{n}/\lambda$.

Zadanie 6.22

Wykazać, że warunek interferencji wynosi $n\lambda = a\cos\theta$, gdzie θ jest kątem pomiędzy wiązką ugiętą a linią atomów dla dwuatomowej linii atomów ABABAB o długości wiązania A-B równaj $1/2a$. Wykazać, że natężenie wiązki ugiętej jest proporcjonalne do $|F_a - F_b|^2$ dla n nieparzystych do $|F_a + F_b|^2$ dla n parzystych.

Zadanie 6.23

Wypisać położenia wszystkich tych atomów, których należy uwzględnić przy obliczaniu geometrycznego czynnika strukturalnego dla sieci: **a)** regularnej przestrzennie centrowanej, **b)** regularnej powierzchniowo centrowanej, **c)** regularnej typu NaCl oraz **d)** regularnej typu diamentu. Komórkę należy traktować jako komórkę prymitywną prostą z bazą.

Zadanie 6.24

Policzyć geometryczne czynniki strukturalne sieci **a)** regularnej przestrzennie centrowanej, **b)** regularnej powierzchniowo centrowanej, **c)** regularnej typu NaCl oraz **d)** regularnej typu diamentu

Zadanie 6.25

Znaleźć możliwe wartości geometrycznego czynnika strukturalnego dla kryształu TlBr krystalizującego w strukturze regularnej prostej z bazą Tl(0,0,0) i Br($1/2, 1/2, 1/2$) oraz związku CsI krystalizującego w tej samej strukturze. CsI tworzy silne jonowy związek, a liczby atomowe $Z_{Cs} = 55$ i $Z_I = 53$. Skomentować otrzymane rezultaty.

Zadanie 6.26

Znaleźć czynnik atomowy dla rozpraszania promieniowania elektromagnetycznego przez atom o stałym rozkładzie gęstości chmury elektronowej w kuli o promieniu R . Przyjąć, że liczba atomowa równa jest Z .

Zadanie 6.27

Znaleźć atomowy czynnik rozpraszania promieniowania elektromagnetycznego przez atom wodoru znajdujący się w stanie podstawowym.

Zadanie 6.28

Znaleźć graficznie pierwsze trzy strefy Brillouina dla płaskiej sieci odwrotnej utworzonej z **(a)** kwadratów o boku a , **(b)** prostokątów o bokach $a/2$ i a .

Zadanie 6.29

Rozważając strukturę diamentu znaleźć możliwe wartości geometrycznego czynnika strukturalnego. Wypisać te płaszczyzny, od których obserwuje się refleksy w zakresie $0^\circ < 2\theta < 60^\circ$ przy założeniu, że parametr sieci wynosi 5 \AA , a długość użytego promieniowania 1 \AA .