Работа 5-1: ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТИПА И ПЕРИОДА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ ВЕЩЕСТВА МЕТОДОМ ДИФРАКЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ

Студент:_____ группа:_____

Допуск_____Выполнение_____Защита_____

Цель работы: ознакомление с методикой электронографического анализа и расчётом электронограмм поликристаллических образцов.

Приборы и материалы: электронограмма

Краткие теоретические сведения

Явление дифракции электронов при их прохождении через тонкие слои поликристаллических и аморфных образцов положено в основу работы электронографа и используется для структурного анализа кристаллических тел. Этот метод анализа структуры кристаллических тел получил название ***электронографии***.

Согласно гипотезе де Бройля, движущаяся частица вещества наряду с корпускулярными свойствами, проявляет так же и волновые свойства. Таким образом, корпускулярно-волновой дуализм, обнаруженный первоначально у световых квантов, оказался всеобщим свойством материи.

Волновой процесс, связанный с движущейся частицей, называют **волнами де Бройля**. Длину волны де Бройля λ, для нерялитивистской частицы можно определить по формуле:

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p},$$

где λ – длинна волны де Бройля (измеряется в метрах или в ангстремах Å ($1\ Å = 10^{-10}\ м$)

$h = 6{,}62 \cdot 10^{-34}\ Дж \cdot с$ – постоянная Планка; m – масса частицы;
v – скорость частицы; $p = mv$ – импульс частицы.

Для электронов, ускоренных напряжением порядка десятка киловольт, длина волны де Бройля λ лежит в области длин волн рентгеновского излучения. Дифракция электронов, рассеянных кристаллической решеткой, так же как и дифракция рентгеновских лучей, описывается ***формулой Вульфа-Брэгга***

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda, \qquad (1)$$

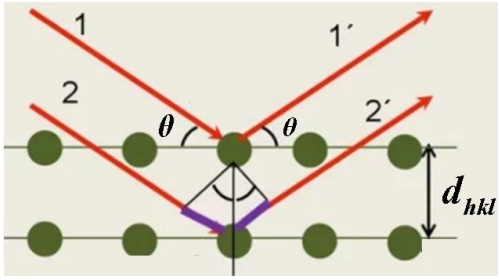


Рис. 1

где θ (тэта)– угол скольжения, то есть угол между падающим пучком и кристаллографической плоскостью;
n –положительное целое число;

d_{hkl} – межплоскостное расстояние (рис. 1), которое можно определить по формуле

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \qquad (2)$$

где h, k, l – индексы Миллера, определяющие положение плоскости в кристалле; a – межатомное расстояние (длина ребра элементарной кубической ячейки) или период кристаллической решётки.

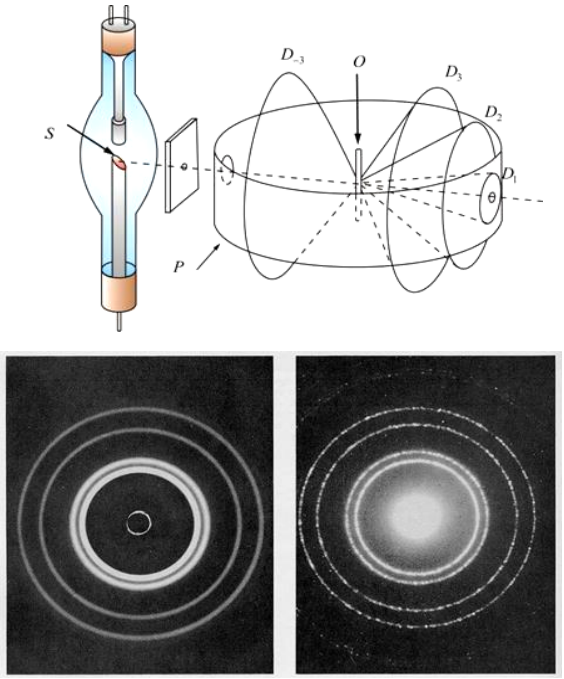


Рис. 2

Для системы плоскостей, параллельной какой-либо грани кубической решётки, d_{hkl} совпадает с периодом кристаллической решётки a.

При прохождении пучка электронов сквозь поликристаллическую пленку, вследствие хаотичности в ориентации монокристалликов в пленке, всегда найдутся системы кристаллических плоскостей, расположенных по отношению к падающему пучку под углами, удовлетворяющими условию (1). Электронные пучки, рассеянные под углом θ (тэта), образуют коническую поверхность с осью, направленной вдоль падающего пучка, и углом при вершине, равным 2θ. На экране, установленном на пути электронов, рассеянных от каждой системы плоскостей, возникает дифракционное кольцо радиуса r. Поэтому полученная электронограмма представляет собой систему концентрических колец (см. рис. 2).

В данной лабораторной работе задача облегчена тем, что выдаются электронограммы с указанным заранее типом сингонии - кубической.

Расчет электронограмм поликристаллических образцов сводится к определению межплоскостных расстояний по формуле (2).

Для расчета удобно находить отношение Q_i квадрата межплоскостного расстояния первого кольца к квадрату межплоскостного расстояния каждого последующего кольца:

$$Q_i = \frac{d^2_{H_1K_1L_1}}{d^2_{H_iK_iL_i}} = \frac{H_i^2 + K_i^2 + L_i^2}{H_1^2 + K_1^2 + L_1^2} = \left(\frac{d_i}{d_1}\right)^2,$$

где d_i - диаметр i-го кольца ($i = 1,2,3,4,5,6$), d_1 - диаметр первого кольца ($i = 1$).

Значения отношений Q_i для первых шести колец электронограммы кубических решеток приведены в табл. 1.

Для расшифровки электронограммы нужно найти ряд отношений Q_i и на основании табл. 1 определить тип кристаллической решётки вещества.

Полученные значения Q_i могут не совпадать точно с табличными значениями, в таком случае тип кристаллической решётки определяют по наиболее близкому к ним ряду.

Таблица 1

Номер дифракции кольца	КУБИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЁТКА		
	Объёмноцентрированная (ОЦК)	Гранецентрированная (ГЦК)	Типа алмаза
1	1	1	1
2	2	1,33	2,66
3	3	2,66	3,33
4	4	3,67	3,67
5	5	4	6,33
6	6	5,33	8

Период кубической решетки рассчитывается по формуле:

$$a_i = \frac{2c}{d_i}\sqrt{H_i^2 + K_i^2 + L_i^2}\ , \qquad (3)$$

где c – постоянная электронографа, значение c указано на выдаваемой электронограмме;

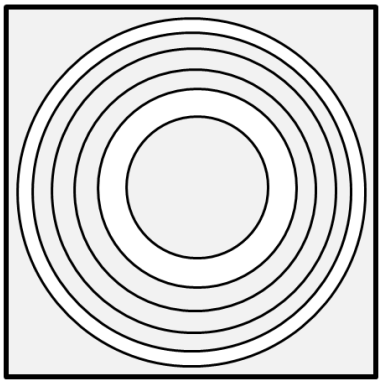
d_i – диаметр i-го кольца;

$H_i^2 + K_i^2 + L_i^2$ – сумма квадратов индексов интерференции, соответствующих i-му кольцу (см. табл.2.).

Таблица 2

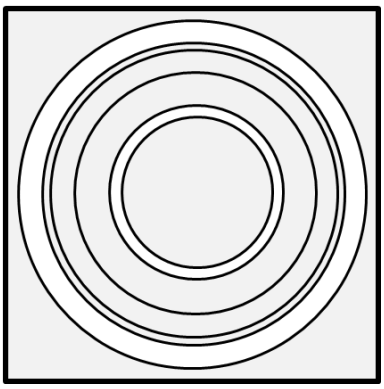
Номер дифракции кольца	КУБИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЁТКА					
	Объёмно-центрированная (ОЦК)		Гранецентрированная (ГЦК)		Типа алмаза	
	HKL	$H^2+K^2+L^2$	HKL	$H^2+K^2+L^2$	HKL	$H^2+K^2+L^2$
1	110	2	111	3	111	3
2	200	4	200	4	220	8
3	211	6	220	8	311	11
4	220	8	311	11	400	16
5	310	10	222	12	331	19

Порядок выполнения работы



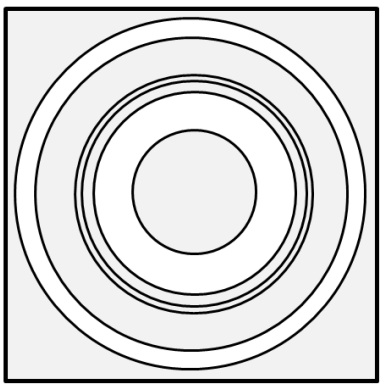
Бригады 1 , 4, 7

$c = 3,22 \cdot 10^{-12}\,\text{м}^2$



Бригады 2 , 5, 8, 10

$c = 3,57 \cdot 10^{-12}\,\text{м}^2$



Бригады 3 , 6, 9

$c = 2,93 \cdot 10^{-12}\,\text{м}^2$

1. Результаты эксперимента снимите к электронограммы для своей бригады. Измерьте линейкой диаметры d_i пяти первых колец по порядку и запишите постоянную электронографа c (указана на рисунке под электронограммой). Данные запишите в таблицу 3.

2. Вычислите значения $Q_i = \left(\dfrac{d_i}{d_1}\right)^2$, где i = 1,2,3,.... - номера колец по порядку;

d_i - диаметр i-го кольца, d_1 - диаметр первого кольца.

Данные занесите в таблицу 3.

3. По полученному вертикальному ряду Q_i с помощью *таблицы 1* определите тип кристаллической решётки, к которой относится электронограмма. Определять надо по тому вертикальному ряду Q_i в *таблице 1*, к которому ближе по значениям относится полученный Вами вертикальный набор Q_i.

Таблица 3

Номер кольца	d_i, *мм*	$Q_i = \left(\dfrac{d_i}{d_1}\right)^2$	$H_i^2 + K_i^2 + L_i^2$	a_i	$< a >$	$S_{\langle a \rangle}$
1						
2						
3						
4						
5						

4. Определив по *таблице 1* тип кристаллической решётки, из *таблицы 2* выпишите значения индексов интерференции $H_i^2 + K_i^2 + L_i^2$ по порядку номеров колец.

5. Определите период кубической решётки по формуле:

$$a_i = \frac{2c}{d_i}\sqrt{H_i^2 + K_i^2 + L_i^2},$$

где c - постоянная электронографа (указана на рисунке под элекронограммой).

Полученный ряд значений a_1, a_2, a_3, a_4, a_5 по соответствующим значениям диаметров колец d_1, d_2, d_3, d_4, d_5 и их индексов интерференции $H_i^2 + K_i^2 + L_i^2$, занесите в *таблицу 3*.

6. Найдите среднее значение периода кристаллической решётки:

$$< a >= \frac{\sum a_i}{n},$$

где n – число измерений.

7. Вычислите среднеквадратичную погрешность измерений:

$$S_{\langle a \rangle} = \sqrt{\frac{\sum (a_i - \langle a \rangle)^2}{n(n-1)}}.$$

8. Окончательный ответ запишите в виде: $a =< a > \pm t_{p,k} S_{\langle a \rangle}$,

где коэффициент Стьюдента $t_{p,k} = 2.8$ для вероятности доверительного интервала $p = 0.95$ при количестве измерений $n = 5$.

Контрольные вопросы

1. Виды агрегатных состояний вещества. Особенности их молекулярной структуры и их свойства.
2. Типы элементарных кристаллических ячеек. Виды сингоний кристаллических ячеек и их отличия.
3. Кристаллические и аморфные твёрдые тела, их свойства.
4. Гипотеза Луи де Бройля. Длина волны де Бройля.
5. Дифракция электронов. Формула Вульфа – Брэггов.
6. Индексы узлов, направлений и плоскостей.

ВНИМАНИЕ: в связи с карантином, Вам не надо проводить эксперимент самостоятельно. За Вас это сделали добрые люди. Ваша задача оформить лабораторную работу по примеру лабораторной работы 0-1 (не надо переписывать всё подряд).

1) Необходима шапка:

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 1-5: СОУДАРЕНИЕ ШАРОВ

Студент_____группа_____

Допуск_____Выполнение_____Защита_____

Цель работы: Проверка закона сохранения импульса. Проверка закона сохранения полной механической энергии для упругих столкновений.

Приборы и принадлежности: прибор для исследования столкновения шаров FPM-08.

(рисунок установки можете не делать)

2) Название упражнения:

Упражнение №1. Проверка закона сохранения импульса при неупругом центральном ударе.
Определение коэффициента восстановления кинетической энергии.

3) Таблица

Номер кольца	d_i, *мм*	$Q_i = \left(\frac{d_i}{d_1}\right)^2$	$H_i^2 + K_i^2 + L_i^2$	a_i	$< a >$	$S_{\langle a \rangle}$
1						
2						
3						
4						
5						

4) Под таблицей расчётные формулы, проверка их размерности и сами вычисления.

5) Грамотно записан ответ.

6) При необходимости сделать вывод и график (где его требуют)

Ответы на контрольные вопросы

1. Виды агрегатных состояний вещества. Особенности их молекулярной структуры и их свойства.

Агрегатным состоянием называется состояние одного и того же вещества, переходы между которыми сопровождаются скачкообразными изменениями его физических свойств (например, плотности, объёма, теплоёмкости и других).

Существуют следующие агрегатные состояния вещества:

1. ***жидкое,***
2. ***твёрдое,***
3. ***газообразное,***
4. ***плазма*** (Ионизированное состояние вещества (то есть вещество состоит не из нейтральных атомов, а из заряженных ионов и свободных электронов, хотя в целом вещество остаётся электрически нейтральным). В этом состоянии находится 99 % видимого вещества во Вселенной, например, Солнце, звёзды, огонь и т.п.)
5. ***Бозе – конденсат*** (обнаружен в 1995 г, состоит из бозонов (частиц с целым спином) и существует при температурах близких к $T=0\ K$),

В Бозе – конденсате атомы теряют свою индивидуальность и начинают вести себя согласованно, как одна большая молекула.

6. ***Ферми- конденсат*** (обнаружен в 2003 г, состоит из фермионов (частиц с полуцелым спином) и существует при температурах близких к $T=0\ K$).

Газ

Газом называется состояние вещества, при котором его частицы очень слабо взаимодействуют друг с другом и движутся свободно, занимая весь предоставленный им объём.

Вещество в газообразной форме имеет форму и объём того сосуда, в котором находится газ.

Частицы газа находятся на больших расстояниях друг от друга и движутся между столкновениями прямолинейно и равномерно, взаимодействуя между собой лишь в момент столкновения друг с другом.

Газы легко сжимаются и их объём существенно зависит от температуры и давления.

Вещество находится в газообразном состоянии, если средняя потенциальная энергия межмолекулярного взаимодействия молекул газа между собой $\langle E_П \rangle$ ***оказывается много меньше средней кинетической энергии теплового поступательного движения молекул этого вещества*** $\langle E_K \rangle$***, то есть***

$$\langle E_П \rangle << \langle E_K \rangle.$$

Жидкость

Жидкостью называется состояние вещества со свойствами промежуточными между твёрдым телом и газом, но обладающее только ей присущими особенностями, например, текучестью и поверхностным натяжением.

Вещество в жидкой форме сохраняет объём, но принимает форму сосуда, в котором она находится.

Средние расстояния между частицами жидкости порядка размера самих молекул ($d \approx (2 \div 3) \cdot 10^{-10}\, м$) и со временем практически не изменяются, в следствие чего жидкость сохраняет свой объём неизменным и практически не сжимается.

Частицы жидкости некоторое время совершают колебания около положения равновесия в окружении других частиц, а затем перескакивают на новое место, чем и объясняется текучесть жидкости.

Вещество находится в жидком состоянии, если средняя потенциальная энергия межмолекулярного взаимодействия молекул жидкости между собой $\langle E_П \rangle$ ***оказывается приблизительно равной средней кинетической энергии теплового поступательного движения молекул этого вещества*** $\langle E_К \rangle$***, то есть*** $\langle E_П \rangle \approx \langle E_К \rangle$.

Твёрдое тело

Твёрдым телом называется агрегатное состояние вещества, которое характеризуется стабильностью формы и объёма.

Частицы твёрдого тела находятся на расстояниях друг от друга порядка размеров самих частиц ($d \approx (1 \div 2) \cdot 10^{-10}\, м$) и совершают колебания малой амплитуды около положений равновесия. Частота колебаний атомов в решётке порядка 10^{12} Гц.

Вещество находится в твёрдом состоянии, если средняя потенциальная энергия межмолекулярного взаимодействия молекул жидкости между собой $\langle E_П \rangle$ оказывается много большей средней кинетической энергии теплового поступательного движения молекул этого вещества $\langle E_К \rangle$, то есть

$$\langle E_П \rangle >> \langle E_К \rangle .$$

2. Типы элементарных кристаллических ячеек. Виды сингоний кристаллических ячеек и их отличия.

В каждой пространственной решётке можно выделить структурный элемент минимального размера, который называется ***элементарной ячейкой***. Вся кристаллическая решетка может быть построена путём параллельного переноса (**трансляцией**) элементарной ячейки по некоторым направлениям.

На рисунке представлены основные типы элементарных кристаллических ячеек.

Виды сингоний

Сингонией называется кристаллографическая система, которая объединяет кристалл по признаку симметрии элементарной ячейки.
(кристаллы, принадлежащие к одной и той же сингонии, имеют подобные углы и стороны элементарных ячеек).

Сингонии отличаются друг от друга параметрами кристаллической ячейки: длинами рёбер a, b, c и углами между ними α, β, γ.

Различают семь видов сингоний:

1. **моноклинная**;
2. **триклинная**;
3. **тригональная**;
4. **тетрагональная**;
5. **гексагональная**;
6. **кубическая**;
7. **ромбическая**.

Сингония	Тип центрировки ячейки Браве				
	примитивная	базо-центрированная	объёмно-центрированная	гране-центрированная	дважды объёмно-центрированная
Триклинная (параллелепипед)					
Моноклинная (призма с параллелограммом в основании)	$\beta \neq 90°$ $a \neq c$	$\beta \neq 90°$ $a \neq c$			
Ромбическая (прямоугольный параллелепипед)	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	
Тетрагональная (прямоугольный параллелепипед с квадратом в основании)	$a \neq c$		$a \neq c$		
Гексагональная (призма с основанием правильного центрированного шестиугольника)	$\gamma = 120°$				$\gamma = 120°$
Кубическая (куб)					

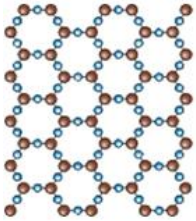
(этот рисунок можно не рисовать)

3. Кристаллические и аморфные твёрдые тела, их свойства.

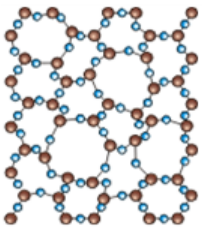
Твёрдое тело чаще всего бывает либо в кристаллическом виде, либо в аморфном виде.

Различия между кристаллическими и аморфными телами

- Кристаллические тела имеют упорядоченное, периодически повторяющееся расположение частиц в пространстве,



- аморфные тела не имеют упорядоченного, периодически повторяющегося расположения частиц в пространстве.



- ***Кристаллические тела*** имеют определённую температуру плавления (то есть при нагревании переходят в жидкое состояние при строго определённой температуре),
- ***аморфные тела*** не имеют определённой температуры плавления (то есть при нагревании постепенно размягчаются и переходят в жидкое состояние).
- ***Кристаллы*** обладают ***анизотропными свойствами*** (то есть по разным направлениям в кристалле его физические свойства (например, механические, магнитные, оптические и другие свойства) имеют различные значения).
- ***аморфные тела*** обладают ***изотропными свойствами*** (то есть по разным направлениям в аморфном теле его физические свойства (например, механические, магнитные, оптические и другие свойства) имеют одинаковые значения).

4. Гипотеза Луи де Бройля. Длина волны де Бройля.

В 1923 году французский физик Луи де Бройль выдвинул гипотезу об ***универсальности корпускулярно-волнового дуализма***. Де Бройль предположил, что не только фотоны, но любые другие частицы материи наряду с корпускулярными обладают также и волновыми свойствами.

Согласно Луи де Бройлю, с каждым микрообъектом связаны, с одной стороны, ***корпускулярные характеристики*** – энергия E и импульс p, а с другой стороны, ***волновые характеристики*** – длина волны λ.

Корпускулярные и волновые характеристики микрообъектов связаны такими же количественными соотношениями, как и у фотона:

$$p = \frac{h}{\lambda},$$

где p - импульс частицы, $\frac{кг \cdot м}{с}$;

$h = 6.62 \cdot 10^{-34}\ Дж \cdot с$ - постоянная Планка,

λ - длина волны де Бройля, $м$.

5. Дифракция электронов. Формула Вульфа – Брэггов.

Первое экспериментальное подтверждение гипотезы де Бройля было получено в 1927 году американскими физиками К. Девиссоном и Л. Джермером. Они обнаружили, что пучок электронов, рассеивающийся на кристалле никеля, дает отчетливую дифракционную картину, подобную той, которая возникает при рассеянии на кристалле рентгеновского излучения.

На установленной за фольгой фотопластинке отчетливо наблюдались концентрические светлые и темные кольца, радиусы которых изменялись с изменением скорости электронов (т. е. длины волны) согласно де Бройлю (см. рис.).

(этот рисунок можно не рисовать)

Таким образом, были экспериментально доказаны волновые свойства у движущихся электронов.
Впоследствии дифракционные явления были обнаружены также для нейтронов, протонов, атомных и молекулярных пучков.

Для электронов, ускоренных напряжением порядка десятка киловольт, длина волны де Бройля λ лежит в области длин волн рентгеновского излучения. Дифракция электронов, рассеянных кристаллической решеткой, так же как и дифракция рентгеновских лучей, описывается ***формулой Вульфа-Брэгга***

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda,$$

где θ (тэта)– угол скольжения, то есть угол между падающим пучком и кристаллографической плоскостью;
n - положительное целое число;
d_{hkl} – межплоскостное расстояние (рис. 1).

6. Индексы узлов, направлений и плоскостей.

Для описания элементарных ячеек пользуются кристаллографическими осями координат, которые проводят параллельно ребрам элементарной ячейки, а начало координат выбирают в левом углу передней грани элементарной ячейки. Элементарная кристаллическая ячейка представляет собой параллелепипед, построенный на ребрах *a*, *b*, *c* с углами α, β и γ между ребрами. Величины *a*, *b* и *c* и α, β и γ называются *параметрами элементарной ячейки* и однозначно ее определяют.

Для обозначения узлов, направлений и плоскостей в кристаллах ввели специальные обозначения (индексы).

1. ***Индексы узла*** записываются в двойных квадратных скобках без запятых

$$[[m\ n\ p]].$$

Положение любого узла относительно выбранного начала координат определяется заданием трёх его координат

$$x = ma,\quad y = nb \text{ и } z = pc,$$

где a, b, c - это параметры элементарной ячейки кристаллической решётки (то есть длины рёбер ячейки),
m, n, p - целые числа, называемые ***индексами узла***.

Для отрицательных индексов над буквой ставится знак минус: $\bar{m}$, $\bar{n}$ или $\bar{p}$,

например, $$[[\bar{2}\,4\,\bar{1}]].$$

2. ***Индексы направления*** записываются в одинарных квадратных скобках

$$[m\ n\ p].$$

Чтобы найти индексы направления, необходимо записать индексы любых двух узлов, через которые проходит данная прямая:

$$[[m_1\ n_1\ p_1]] \text{ и } [[m_2\ n_2\ p_2]].$$

Уравнение прямой, проходящей через эти узлы, задаётся уравнением:

$$\frac{x-m_1}{m_2-m_1}=\frac{y-n_1}{n_2-n_1}=\frac{z-p_1}{p_2-p_1}$$

Величины, стоящие в знаменателе этого равенства

$$m=m_2-m_1; \quad n=n_2-n_1 \text{ и } p=p_2-p_1$$

будут искомыми индексами направлений $[m\ n\ p]$.

Индексы направления задают не одну прямую в кристалле, а семейство параллельных прямых.

3. ***Индексы плоскости*** записываются в одинарных круглых скобках без запятых

$$(h\ k\ l).$$

Чтобы найти индексы плоскости, необходимо записать индексы любых трёх узлов, через которые проходит данная плоскость:

$$[[m_1\ n_1\ p_1]],\ [[m_2\ n_2\ p_2]] \text{ и } [[m_3\ n_3\ p_3]].$$

Уравнение плоскости, проходящей через эти узлы, задаётся определителем третьего порядка:

$$\begin{vmatrix} x-m_1 & y-n_1 & z-p_1 \\ m_2-m_1 & n_2-n_1 & p_2-p_1 \\ m_3-m_1 & n_3-n_1 & p_3-p_1 \end{vmatrix}=0$$

Решить этот определитель можно методом треугольника.

Решая этот определитель, получим уравнение вида:

$$hx+ky+lz=const.$$

Числа h,k,l при x,y и z будут искомыми индексами плоскостей

$$(h\ k\ l).$$

Индексы плоскости задают не одну плоскость в кристалле, а семейство параллельных плоскостей.