

# F7030 Rtg rozptyl na tenkých vrstvách – Úlohy ke kolokviu

Verze 6. listopadu 2023.

## 1 Difrakce na zadané mřížce

Máme zadanou krystalovou mřížku s rozměry  $a = 5, b = 10, c = 15 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$  a záření s vlnovou délkou  $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$  (záření  $\text{CuK}\alpha$ ):

- Určete parametry reciproké mřížky  $a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$  a objem přímé a reciproké elementární buňky.
- Spočtete mezivzdálenost  $d$  a difrakční úhel  $\theta$  pro difrakční roviny (321).
- Předpokládejme, že dopadající svazek je kolmý na osu  $c$ . Určete graficky pomocí Ewaldovy konstrukce orientaci krystalu ve které se pozoruje difrakce (320). Tato orientace může být definována úhly mezi dopadajícím svazkem  $\mathbf{s}_0$  a vektory  $\mathbf{a}^*$  a  $\mathbf{b}^*$ . Spočtete tyto úhly.
- Určete maximální počet Braggových difrakcí, které mohou být pozorovány  $\text{CuK}\alpha$  zářením.
- Určete maximální hodnoty Laueho indexů pozorovatelné difrakce  $h_{\max}, k_{\max}, l_{\max}$ .

## 2 Analýza práškové difrakce

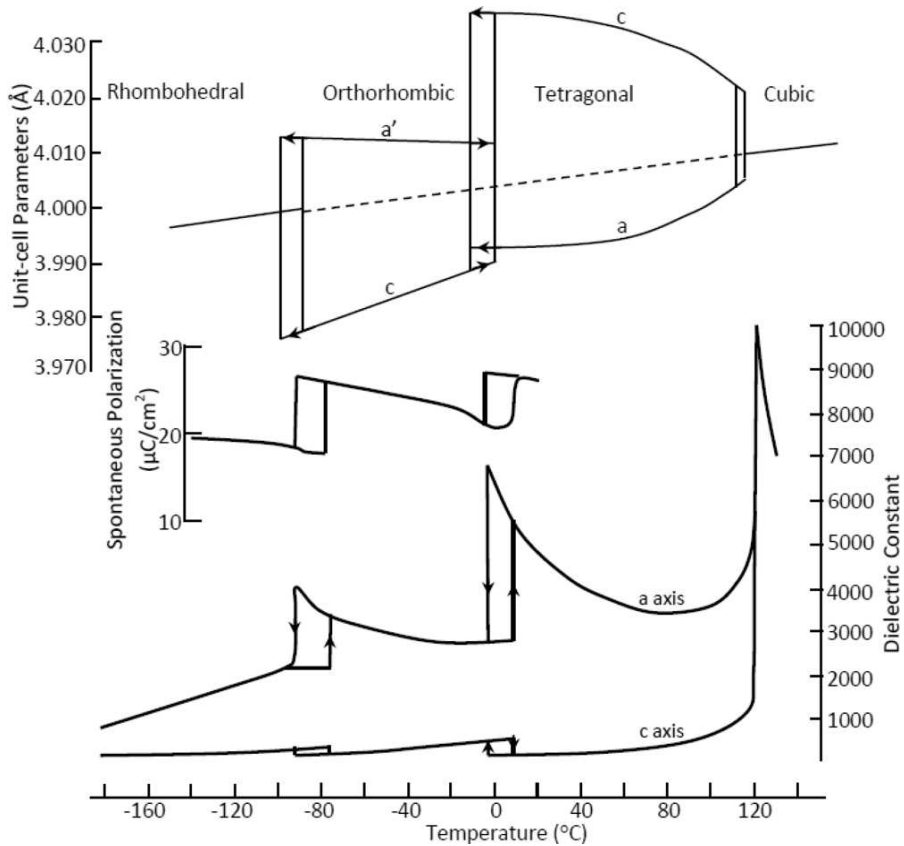
V tabulce jsou výsledky měření práškové difrakce čtyř kubických materiálů měřených zářením  $\text{CuK}\alpha$  s vlnovou délkou  $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ . Braggovy úhly jsou naměřené s přesností  $0.01^\circ$ ; intenzity jsou normovány tak, že nejsilnější difrakce má intenzitu  $I = 100$ . Určete Laueho difrakční indexy jednotlivých difrakčních čar a typ Bravaisovy mřížky.

	NaCl		CuZn		W		Si	
Line No.	$\theta [^\circ]$	$I$	$\theta [^\circ]$	$I$	$\theta [^\circ]$	$I$	$\theta [^\circ]$	$I$
1	13.68	13	15.15	6	20.15	100	14.23	100
2	15.86	100	21.75	100	29.16	15	23.67	55
3	22.74	55	26.93	1	36.63	23	28.08	30
4	26.95	2	31.53	15	43.55	8	34.60	6
5	28.26	15	35.76	2	50.38	11	38.22	11
6	33.14	6	39.85	29	57.53	4	44.06	12
7	36.57	1	47.72	5	65.69	18	47.52	6
8	37.69	11	51.65	1	76.99	2	53.42	3
9	42.03	7	55.81	8			57.11	7
10	45.25	1	60.13	1			63.86	8

## 3 Difrakce na různých fázích $\text{BaTiO}_3$

Při teplotách nad  $120^\circ\text{C}$  je struktura  $\text{BaTiO}_3$  kubická, krystalová grupa  $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ ,  $a \approx 4 \text{ \AA}$ . Při teplotě  $120^\circ\text{C}$  dochází k fázovému přechodu a krystal se stane feroelektrickým. Mezi teplotami  $0^\circ\text{C}$  a  $120^\circ\text{C}$  má krystal tetragonální strukturu, prostorová grupa  $\text{P4mm}$ ,  $a = 3.99, c = 4.03 \text{ \AA}$  (při pokojové teplotě). Tento přechod může být pozorován práškovou difrakcí, protože určité difrakční čáry se rozštěpí při změně struktury z kubické na tetragonální. Určete které to jsou.

Určete rozštěpení difrakčních pík i při dalších přechodech při nižších teplotách, nejprve do ortorombické a posléze romohedrálční fáze.



Obrázek převzat z: Gertsen, Smith, The physics and chemistry of materials, Wiley 2001.

#### 4 SAXS na částicích tvaru rotačního elipsoidu

Spočtete rozložení intenzity rozptýleného záření ve vhodné rovině reciprokého prostoru na částicích tvaru rotačních elipsoidů. Volte různé poměry délek poloos rotačního elipsoidu a sledujte změnu rozložení intenzity. Velikost částic uvažujte v řádu desítek nanometrů.

#### 5 GISAXS na kulových částicích na rovinném povrchu

Spočtete rozložení intenzity rozptýleného záření ve vhodné rovině reciprokého prostoru na zlatých částicích tvaru koule umístěných na povrchu hladké křemíkové desky v aproximaci DWBA, t.j. se započtením odrazu na povrchu desky. Vliv uspořádání částic zanedbejte, předpokládejte řídce usazené částice. Jak závisí rozložení intenzity na úhlu dopadu? Velikost částic uvažujte v řádu desítek nanometrů.

#### 6 Maloúhlý rozptyl na uspořádaných kulových částicích s krátkodosahovým uspořádáním

Spočtete rozložení intenzity rozptýleného záření ve vhodné rovině reciprokého prostoru na zlatých částicích tvaru koule umístěných v řídké matici. Předpokládejte rozložení částic s krátkodosahovým uspořádáním, výpočet proveďte pro různé parametry uspořádání. Velikost částic uvažujte v řádu desítek nanometrů.

## 7 Malouhly rozptyl na uspořádaných kulových částicích s dalekodosa-hovým uspořádáním

Spočtete rozložení intenzity rozptýleného záření ve vhodné rovině reciprokého prostoru na zlatých částicích tvaru koule umístěných v řídké matici. Předpokládejte rozložení částic s dalekodosa-hovým uspořádáním, výpočet proveďte pro různé parametry uspořádání. Velikost částic uvažujte v řádu desítek nanometrů.

## 8 Rtg. odrazivost na hladké multivrstvě

Spočtete rtg. odrazivost na hladké periodické multivrstvě na substrátu. Popište vliv tloušťek jednotlivých vrstev.

## 9 Rtg. odrazivost na drsné tenké vrstvě

Spočtete rtg odrazivost tenké vrstvy na substrátu. Popište vliv drsnosti jednotlivých rozhraní a tloušťky vrstvy.

## 10 Rtg. odrazivost na drsné multivrstvě

Spočtete rtg. odrazivost na drsné periodické multivrstvě na substrátu. Popište vliv drsností jednotlivých rozhraní.

## 11 Dynamická difrakce na polonekonečném krystalu

Spočtete závislost difraktované intenzity na úhlu dopadu na polonekonečném krystalu křemíku v různých difrakcích. Porovnejte vliv různé asymetrie na výslednou křivku.

## 12 Dynamická difrakce na tenkém a polonekonečném krystalu

Spočtete závislost difraktované intenzity na úhlu dopadu na polonekonečném a tenkém krystalu křemíku ve vybrané symetrické difrakci. Porovnejte vliv tloušťky krystalu na difrakční křivku.

## 13 Dynamická difrakce na tenké epitaxní vrstvě

Spočtete závislost difraktované intenzity na úhlu dopadu na tenké pseudomorfní vrstvě InAs/GaAs (001) v difrakci 004. Sledujte vliv tloušťky vrstvy.

V pseudomorfní vrstvě dojde vlivem stlačení krystalové mřížky v rovině povrchu k jejímu roztažení ve směru kolmo k povrchu. Z klasické teorie elasticity vychází mřížový parametr v kolmém směru jako

$$a_{\perp} - a_{\text{InAs}} = -2 \frac{c_{12}}{c_{11}} (a_{\parallel} - a_{\text{InAs}}), \quad a_{\perp} = a_{\text{InAs}} - 2 \frac{c_{12}}{c_{11}} (a_{\text{GaAs}} - a_{\text{InAs}}).$$

Elastické parametry InAs jsou  $c_{11} = 83,4 \text{ GPa}$  a  $c_{12} = 45,4 \text{ GPa}$ .

## 14 Nekoherentní rozptyl na drsném povrchu

Spočtete koherenční funkci drsnosti pro několik hodnot drsnosti, korelační délky a Hurstova faktoru. Vypočtete tvar difúzního rozptylu například při měření takzvaného omega scanu (konstantní rozptylový úhel) nebo pro konstantní normálovou složku rozptylového vektoru  $Q_z$ .

## 15 Poznámky

Pokud není uvedeno jinak, předpokládejte vlnovou délku  $K_{\alpha 1}$  mědi  $\lambda_{\text{Cu}K_{\alpha 1}} = 1.54056 \text{ \AA}$ . Materiálové parametry (příslušné komponenty dielektrické susceptibility, mřížové parametry běžných materiálů) se dají nalézt například na webových stránkách Sergeje Stepanova <http://sergey.gmca.aps.anl.gov/>.