

## MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU

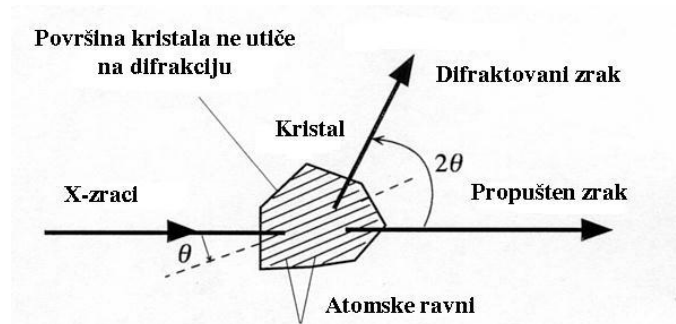
## Računske vežbe

## 3. BRAGOV ZAKON DIFRAKCIJE

## TEORIJSKI PREGLED

**X zraci** predstavljaju visokofrekventno energetska zračenje koje može biti belo zračenje ili diskretno, karakteristično x-zračenje. Karakteristično zračenje se javlja pri prelasku pobuđenih elektrona sa viših na niže energetske nivoe, a belo zračenje odgovara neelastičnim sudarima elektrona sa atomima kristalne rešetke. S obzirom da je talasna dužina x-zraka reda veličine 10nm to se kristalna rešetka, čiji su parametri rešetke ispod 10nm, ponaša kao prirodna difrakciona rešetka za x-zrake. Naime, identifikacija kristalne strukture i određivanje njenih parametara bazira se na difrakciji elektromagnetnih (EM) talasa, elektrona i neutrona ( $\lambda \leq 0.1 \text{ nm}$ ) na kristalnoj rešetki. Difrakcione metode zasnovane su na analizi difrakcione slike, odnosno raspodele intenziteta zračenja. Svaki izgrađivač na koji padne EM zrak je izvor koherentne svetlosti (slika 1), ali se maksimalno zračenje (amplituda) postiže samo pri određenim uslovima. Pri rasejavanju x-zraka sa kristalne rešetke javlja se difrakciona slika ako je došlo do konstruktivne interferencije, odnosno ako su zadovoljeni sledeći uslovi:

1. Ugao upadnog x-zračenja jednak je uglu rasejanog x-zračenja
2. Razlika puteva između dva talasa jednaka je celobrojnom umnošku talasne dužine x-zraka.



Slika 1. Difrakcija x-zraka na kristalu

Uslov za dobijanje maksimalnog intenziteta difraktovanih x-zraka dat je preko **Bragovog zakona**:

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

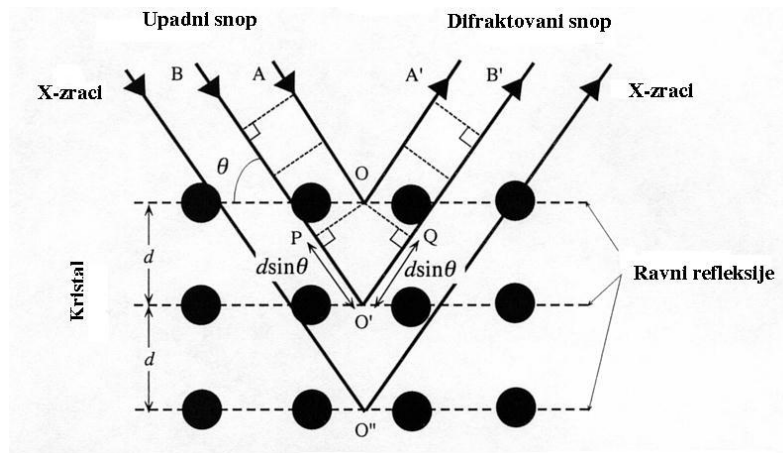
gde je  $d$  rastojanje između kristalografskih ravni,  $\theta$  ugao između upadnog zraka i ravni od koje se zrak odbija,  $n$  red difrakcije, a  $\lambda$  talasna dužina x-zraka (slika 2).

U zavisnosti od tipa kristalne rešetke do difrakcije x-zraka može doći u

- PK sistemu sa bilo koje ravni,
- PCK sistemu sa ravni čiji su Milerovi indeksi svi parni ili svi neparni brojevi,
- ZCK sistemu sa ravni za koje je zadovoljen uslov da je zbir Milerovih indeksa paran broj.

## MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU

## Računske vežbe



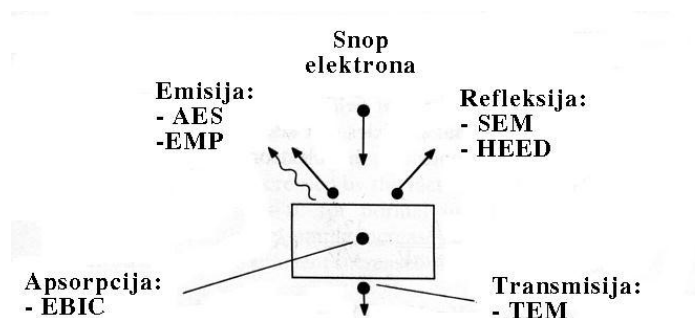
Slika 2. Ilustracija Bragovog zakona difrakcije x-zraka

Za analizu strukture materijala koriste se različiti tipovi mikroskopa. Analiza strukture se analizira na osnovu slike dobijene refleksijom elektrona sa površine uzorka (SEM, HEED mikroskopi), transmisije elektrona kroz uzorak (TEM mikroskop), emisijom elektrona sa uzorka (AES, EMP mikroskopi) ili apsorpcijom elektrona (EBIC mikroskop). Ilustracija je prikazana na slici 3. Za ispitivanje površine materijala koristi se i elektronska difrakcija. Elektronski snop se dobija termoelektronskom emisijom sa zagrejjane katode od W ili LaB<sub>2</sub>. Emitovani elektroni za ispitivanje kristala treba da imaju  $\lambda \leq 0.1 \text{ nm}$ . Polazeći od izraza za kinetičku energiju i de Brojjeve relacije:

$$eU = \frac{1}{2}mv^2 \quad \wedge \quad \lambda = \frac{h}{mv}$$

za talasnu dužinu dobija se:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2eUm}} = \sqrt{\frac{150}{U}} \cdot 10^{-10} \text{ [m]}.$$



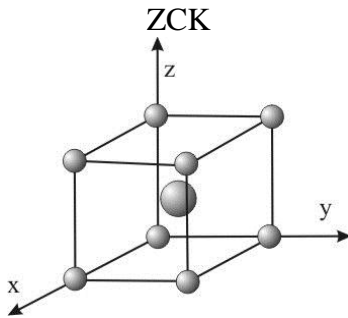
Slika 3. Ilustracija principa rada različitih tipova mikroskopa

## MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU

## Računske vežbe

**ZADATAK 1.** Molibden kristališe u ZCK kubnom sistemu. Njegova gustina iznosi  $d=10.2 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$ , a atomska masa 95.94. Odrediti moguće Milerove indekse ravni u kristalu molibdena koje daju jaku refleksiju x zračenja pri uglu od  $26.77^\circ$  i pri prvom redu refleksije. Talasna dužina x-zraka je 0.1nm.

Rešenje:



$$\Theta = 26,77^\circ$$

$$\lambda = 0,1 \text{ nm}$$

$$M_{Mo} = 95,94$$

$$\text{Za ZCK } n_i = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$$

Konstanta kristalne rešetke se izračunava iz gustine kristala

$$d = \frac{n_i \cdot M_{Mo}}{a^3 \cdot N_A}$$

$$a = \sqrt[3]{\frac{n_i \cdot M_{Mo}}{d \cdot N_A}} = \sqrt[3]{\frac{2 \cdot 95,94}{10,2 \cdot 10^3 \cdot 6,02 \cdot 10^{26}}} = 3,15 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$n\lambda = 2d_{(h \ k \ l)} \sin \theta$$

$$n = 1 \quad \text{Prvi red refleksije}$$

$$d_{(h \ k \ l)} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{0,1 \cdot 10^{-9}}{2 \sin 26,77^\circ} = 1,11 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Prema definiciji za kubni sistem

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

$$h^2 + k^2 + l^2 = \frac{a^2}{d^2} = \left(\frac{a}{d}\right)^2 = \left(\frac{3,15 \cdot 10^{-10}}{1,11 \cdot 10^{-10}}\right)^2 = 8,053$$

S obzirom da zbir kvadrata Milerovih indeksa mora da bude ceo broj može se napisati da je 8. Za ZCK rešetku uslov da bi došlo do difrakcije je da zbir Milerovih indeksa  $h+k+l$  bude paran broj. Moguće ravni su:

$$(2 \ 0 \ 2) \quad (2 \ 2 \ 0) \quad (0 \ 2 \ 2)$$

$$(\bar{2} \ 0 \ \bar{2}) \quad (\bar{2} \ \bar{2} \ 0) \quad (0 \ \bar{2} \ \bar{2})$$

$$(\bar{2} \ 0 \ 2) \quad (\bar{2} \ 2 \ 0) \quad (0 \ \bar{2} \ 2)$$

$$(2 \ 0 \ \bar{2}) \quad (2 \ \bar{2} \ 0) \quad (0 \ 2 \ \bar{2})$$

**MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU****Računske vežbe**

**ZADATAK 2.** Elektronski snop, ubrzan u polju sa potencijalnom razlikom od 100V, pada na uzorak od polikristalnog aluminijuma (Al). Difrakciona slika pokazuje da se najjači intenzitet difraktovanja elektronskog snopa dobija sa ravni (111) pri uglu  $2\theta=30.4^\circ$ . Aluminijum ima PCK rešetku sa radijusom jona  $r=0.118\text{nm}$ .

- Izračunati talasnu dužinu elektrona na osnovu Bragovog zakona.
- Uporediti ovu talasnu dužinu sa talasnom dužinom izračunatom na osnovu de Brojjeve relacije koristeći podatak da je ubrzavajući napon  $U=100\text{V}$ .

*Rešenje:*

a) Polazeći od Bragovog zakona:

$$2d \sin \theta = n\lambda, n = 1$$

s obzirom da aluminijum ima PCK rešetku, za konstantu rešetke dobija se:

$$a = 2r\sqrt{2} = 3.32 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

tako da je rastojanje između ravni sa Milerovim indeksima (111):

$$d = \frac{a}{\sqrt{3}} = 1.9 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

konačno je:

$$\lambda = 2 \cdot 0.19 \cdot 10^{-9} \text{ m} \cdot \sin 15.2 = 0.099 \text{ nm}$$

b) Polazeći od izraza za kinetičku energiju i de Brojjeve relacije, za talasnu dužinu dobija se:

$$eU = \frac{mv^2}{2}, \lambda = \frac{h}{mv} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}} = 0.1226 \text{ nm}$$

**MATERIJALI ZA ELEKTRONIKU****Računske vežbe**

**ZADATAK 3.** Kristal Al čija je atomska masa  $M=26.98$  a gustina  $d=2.7 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$  karakteriše PCK tip rešetke. Izračunati ugao pod kojim će se elektroni ubrzani naponom od  $U=80 \text{ V}$  difraktovati sa ravni (111) ovog kristala.

*Rešenje:*

Na osnovu izraza za kinetičku energiju i de Brojjeve relacije za talasnu dužinu dobija se:

$$E = eU = \frac{m_e v_e^2}{2}$$

$$\lambda = \frac{h}{p_e} = \frac{h}{m_e v_e} = \frac{h}{\sqrt{2eUm_e}} = 1.37 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Iz izraza za gustinu kristala, za konstantu kristalne rešetke dobija se:

$$d = \frac{n_i M}{a^3 N_A} \Rightarrow a = \sqrt[3]{\frac{n_i M}{d N_A}}, n_i = 4(\text{PCK})$$

$$a = 4.049 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Korišćenjem Bragovog zakona i izraza za rastojanje između paralelnih ravni sa Milerovim indeksima (h k l), za ugao difrakcije dobija se:

$$n\lambda = 2d \sin \theta, n = 1$$

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = 2.338 \cdot 10^{-10} \text{ m} \Rightarrow \sin \theta = \frac{\lambda}{2d} \Rightarrow \theta = 17.04^\circ .$$