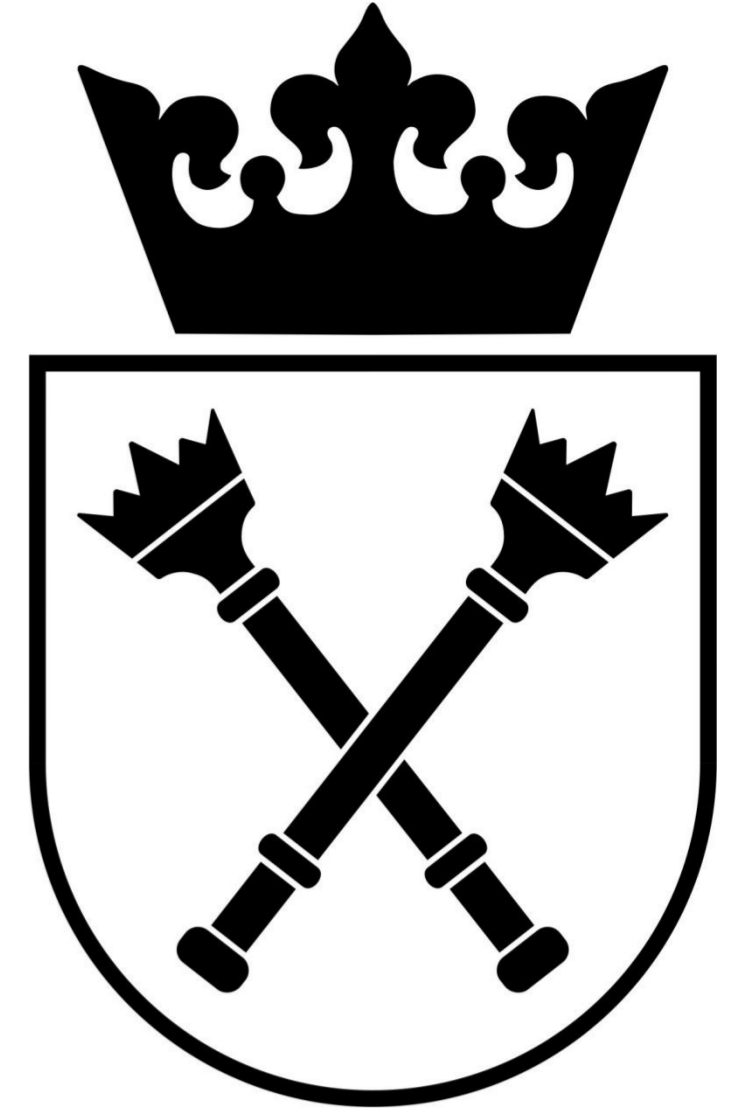


Badanie modeli powierzchni krystalicznych metodami dyfrakcyjnymi

Marek Kopciuch, pod opieką prof. Dr hab. Jacka Kołodzieja

Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej, Uniwersytet Jagielloński.



Abstrakt

Celem przeprowadzonego eksperymentu było odtworzenie wzorów dyfrakcyjnych uzyskanych z modeli poprzez ich transformatę Fouriera oraz wyznaczenie dla nich komórek elementarnych i wektorów sieci rzeczywistej i odwrotnej.

Sieć odwrotna

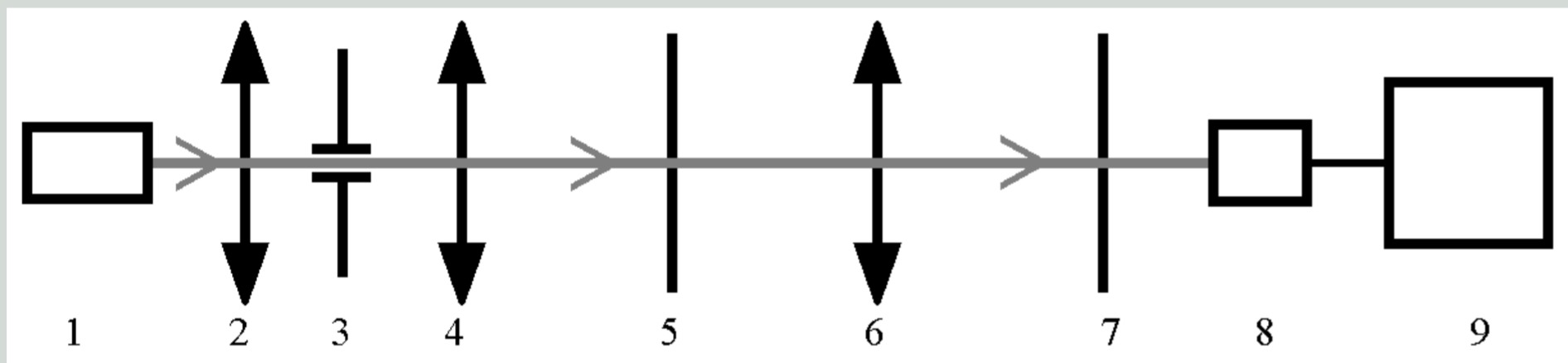
Jest to sieć wektorów w przestrzeni falowej powstała podczas transformacji Fouriera rozkładu koncentracji elektronów. Wektory podstawowe sieci odwrotnej są zdefiniowane jako:

$$b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)}, \quad b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)}, \quad b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)}$$

Łatwo zauważyć, że tak zdefiniowany zbiór wektorów spełnia następującą relację:

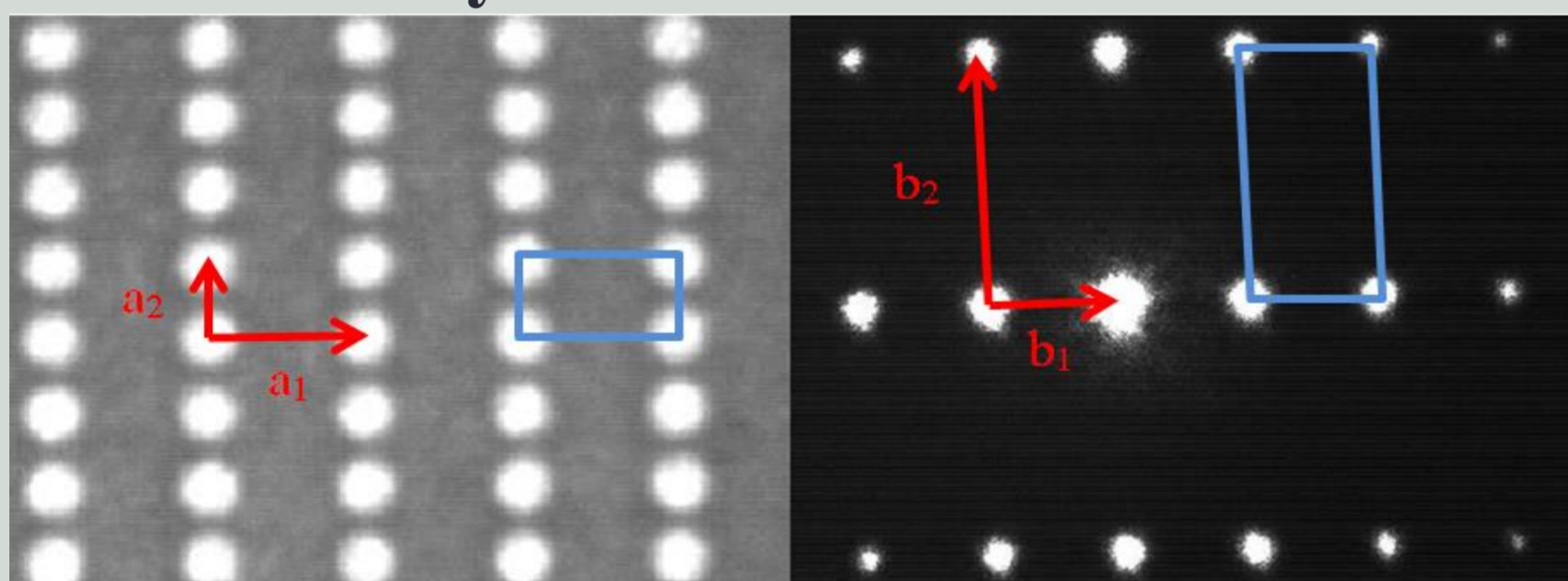
$$a_i \cdot b_j = 2\pi \delta_{ij}$$

Układ eksperymentalny



Układ składał się z: 1 – laser He-Ne; 2, 4, 6 – soczewki skupiające, 3 – pin-hole, 5 – maska z modelem, 7 – ekran, 8 – kamera CCD, 9 – komputer.

Wybór wektorów sieci



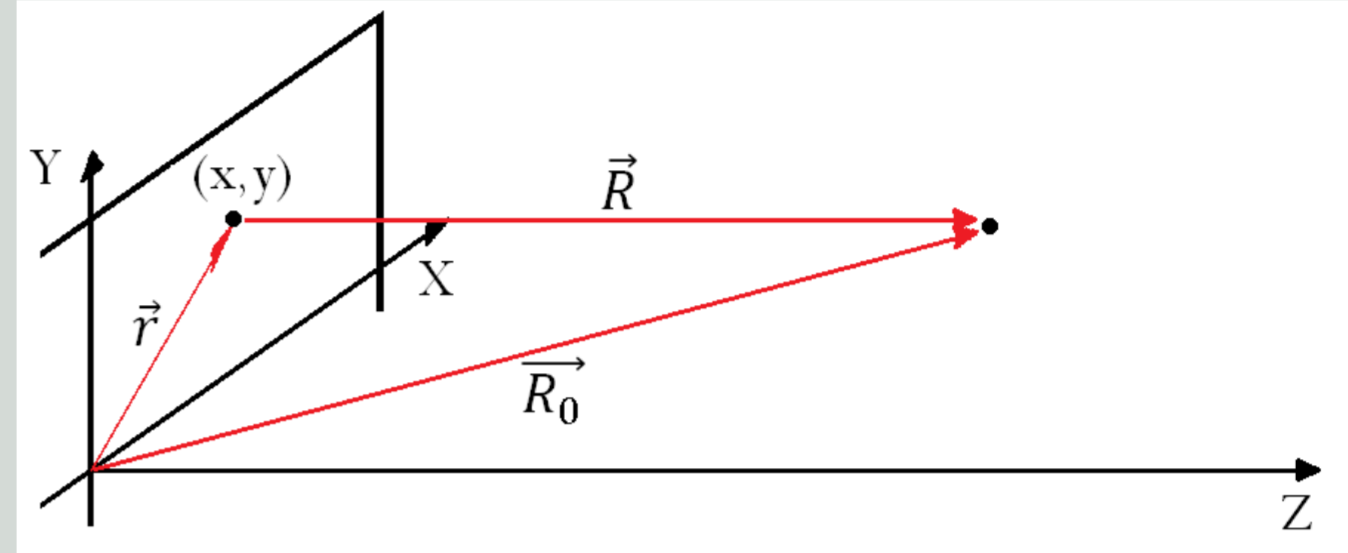
Zarejestrowany obraz dla maski kw **brakujące rzędy**: rzeczywisty (lewy) i dyfrakcyjny (prawy). Na niebiesko zaznaczono komórki elementarne, natomiast na czerwono wektory prymitywne sieci. Zgodnie z relacją łączącą sieć odwrotną i rzeczywistą iloczyn długości odpowiednich wektorów powinien być stały.

	a_i	b_i	$a_i \cdot b_i$	Błąd procentowy
Wektor 1 [j.u.]	66.2	61.3	4058.06	0.0365
Wektor 2 [j.u.]	33.8	120.5	4072.9	

Podsumowanie

Jak widać błędy uzyskane w czasie obliczeń są niskie, co oznacza, że wektory w sieciach pierwotnej oraz odwrotnej, zostały wybrane poprawnie. Dodatkowo zauważalna jest bardzo wysoka korelacja pomiędzy obrazami dyfrakcyjnymi oraz obrazami uzyskanymi poprzez matematyczną transformatę Fouriera. Potwierdza to fakt, że obraz dyfrakcyjny jest realizowany przez transformatę Fouriera obiektu, na którym następuje dyfrakcja.

Dyfrakcja na sieci dwuwymiarowej



Aby opisać dyfrakcje na płaskich powierzchniach krystalicznych korzystamy z zasady Huyghensa, czyli faktu, że każdy punkt sieci jest źródłem fali kulistej. Oznacza to, że elementarny przyczynik do amplitudy fali rozproszonej wynosi:

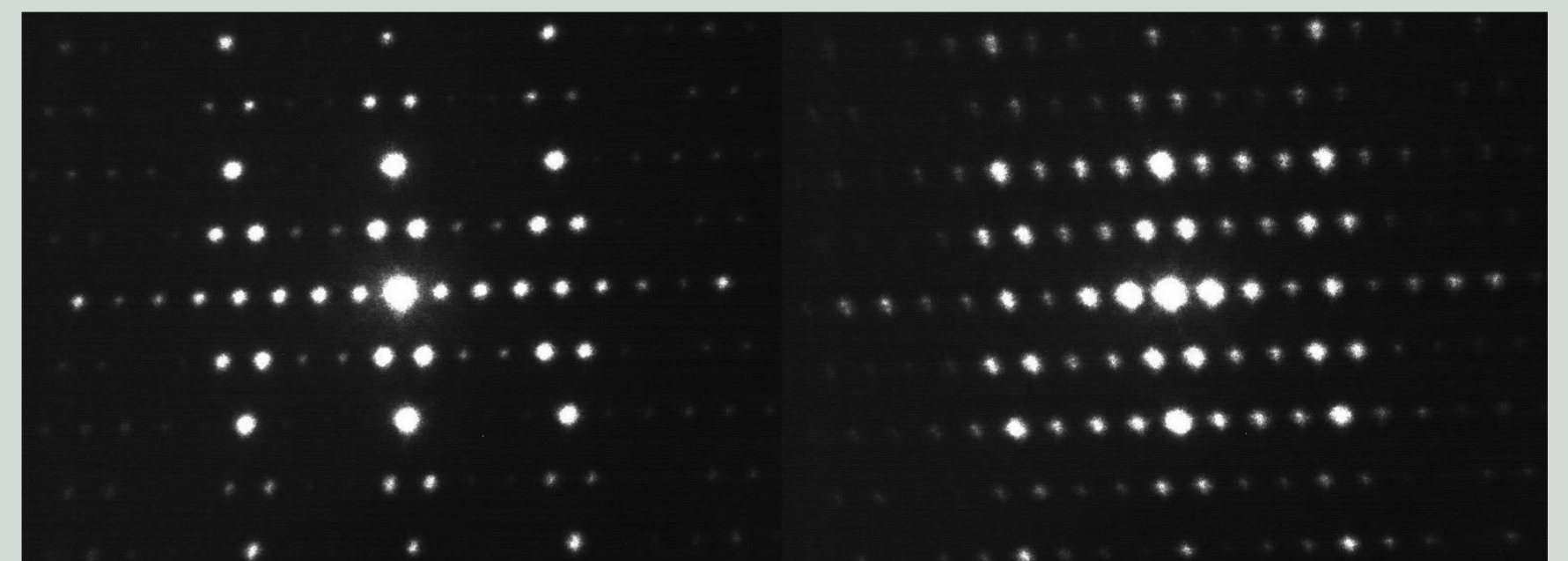
$$d\vec{A} = \frac{f(x,y)}{R} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R} - \omega t)} = \frac{f(x,y)}{|\vec{R}_0 - \vec{r}|} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R}_0 - \omega t)} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \approx \frac{f(x,y)}{R_0} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R}_0 - \omega t)} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Następnie wyciągnięcie powyższej relacji przy założeniu dyskretnego rozkładu atomów w sieci pozwala na wyliczenie amplitudy fali rozproszonej:

$$I = \frac{1}{R_0^2} \left| \int f(x,y) e^{i(k_x x + k_y y)} dx dy \right|^2 \frac{\text{Sin}^2(\frac{N}{2} k_{\parallel} \cdot \vec{a}) \text{Sin}^2(\frac{N}{2} k_{\parallel} \cdot \vec{b})}{\text{Sin}^2(\frac{1}{2} k_{\parallel} \cdot \vec{a}) \text{Sin}^2(\frac{1}{2} k_{\parallel} \cdot \vec{b})}$$

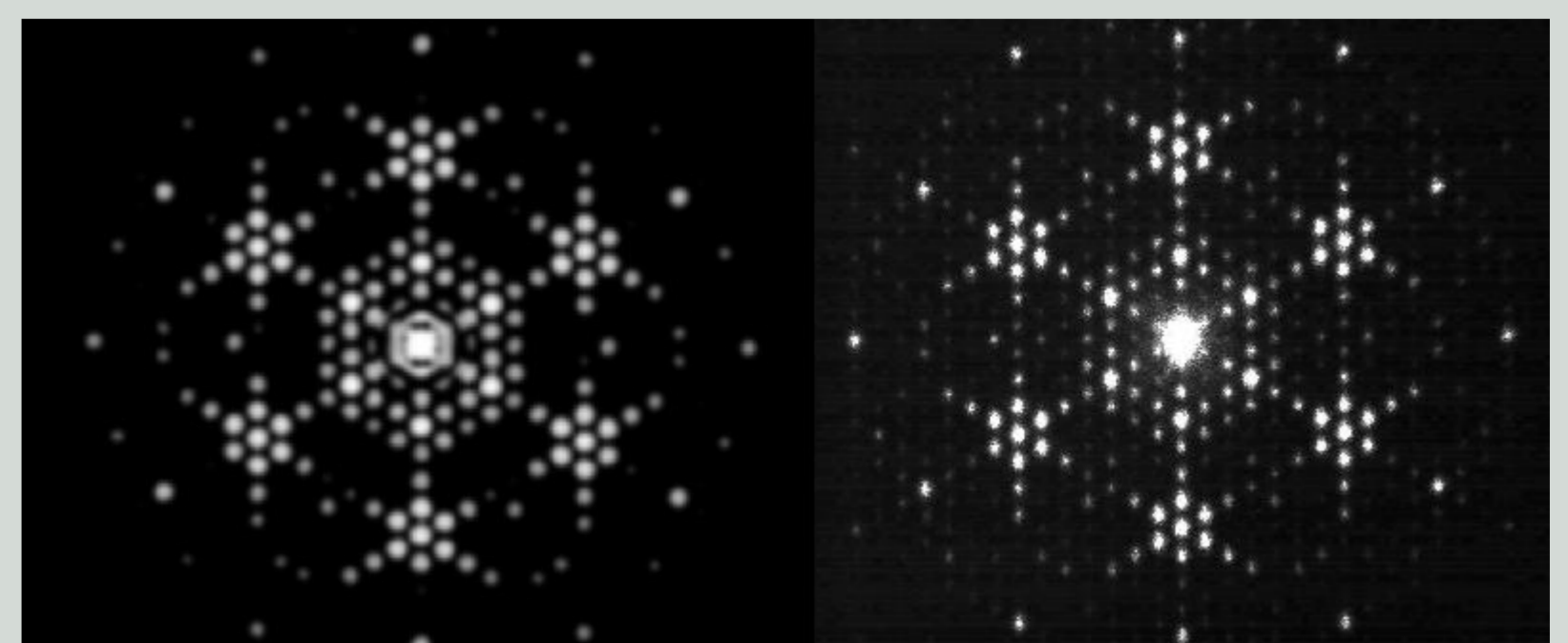
Form factor Czynniki „siatki dyfrakcyjnej”

Czynniki form factor



Porównanie dwóch obrazów dyfrakcyjnych, dla masek o takim samym czynniku siatki, ale zasadniczo różnym form factorze. Po lewej kw C(8x2) InSb jonees 2000 L, po prawej kw C(8x2) john 89 L.

Transformata fizyczna i matematyczna



Porównanie obrazu dyfrakcyjnego (prawy), z transformatą Fouriera rzeczywistego obrazu (lewy), na przykładzie maski heks Si (111) 7x7.

BIBLIOGRAFIA

- [1] Instrukcja do ćwiczenia Z17, II PF, IF UJ
- [2] C. Kittel *Wstęp do fizyki ciała stałego*, PWN Warszawa 1999