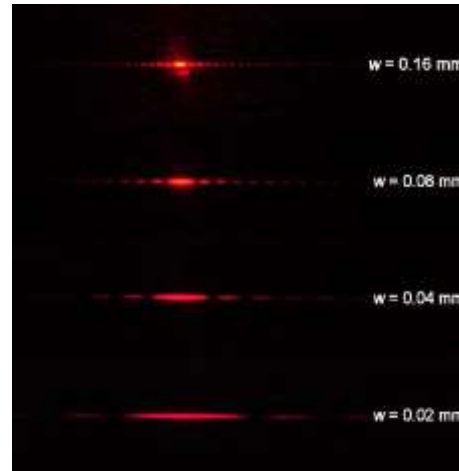
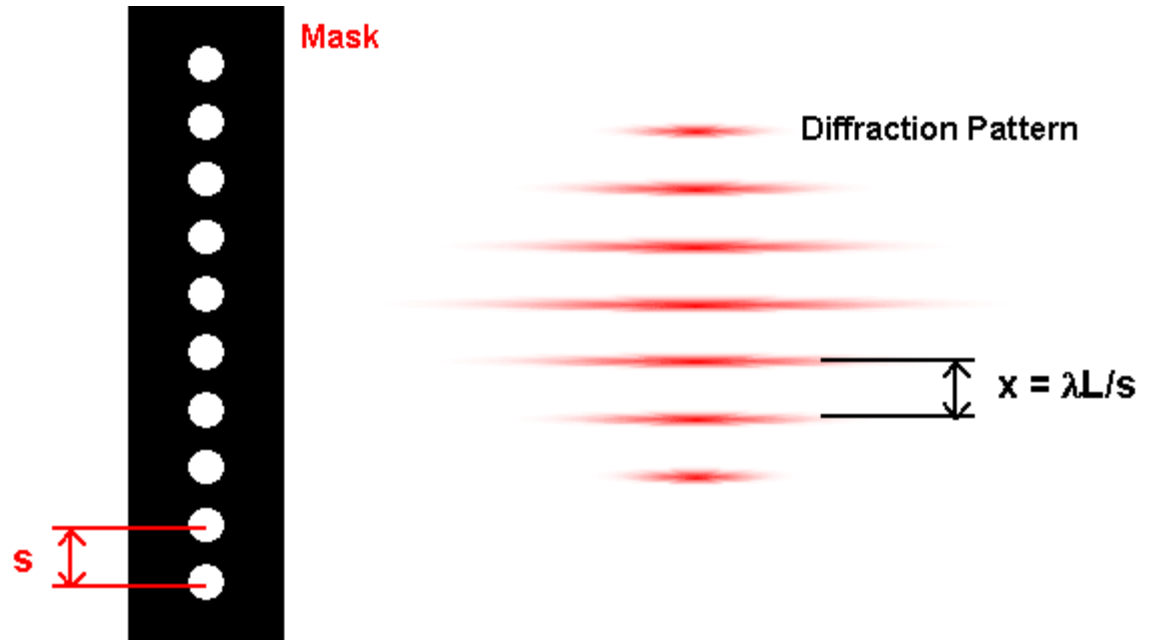


ΕΙΚΟΝΕΣ ΠΕΡΙΘΛΑΣΗΣ (Diffraction patterns) 1-D

1 σχισμή εύρους w

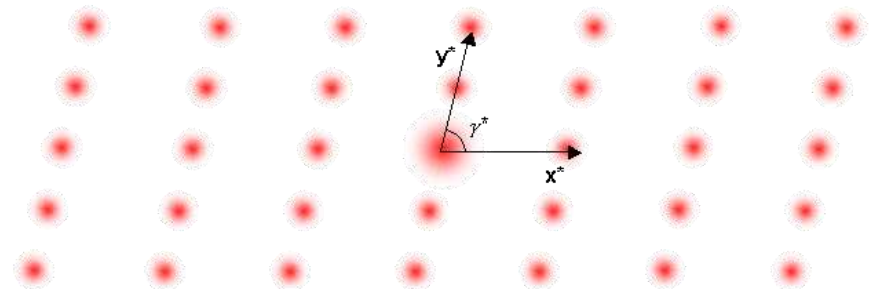
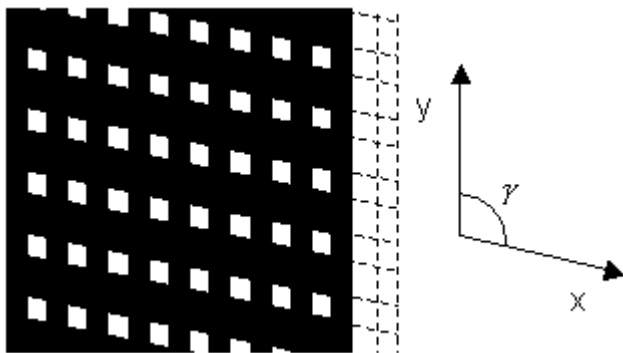
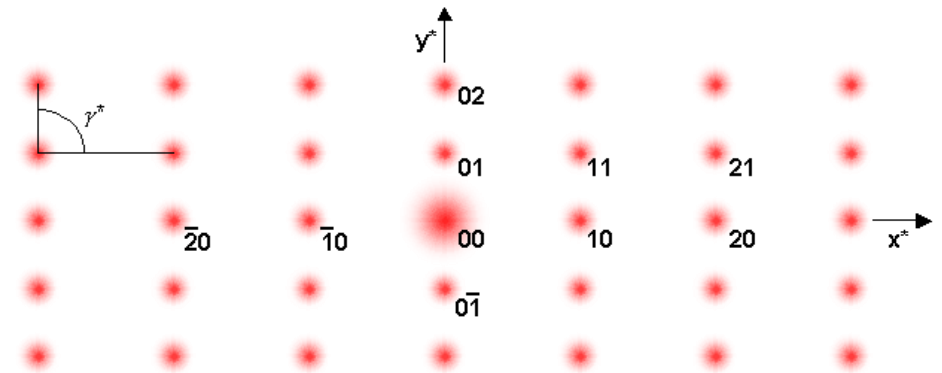
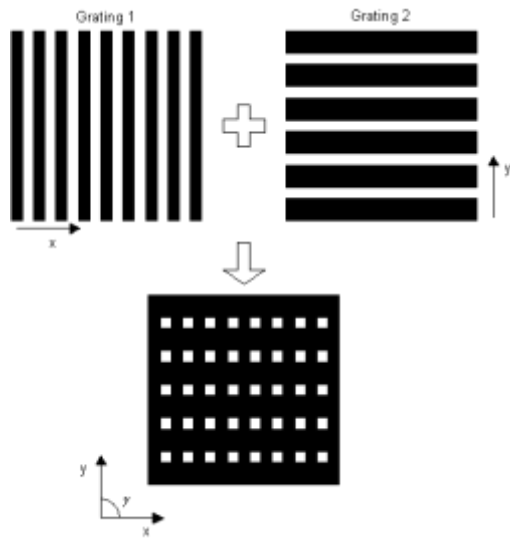


Μονοδιάστατο πλέγμα



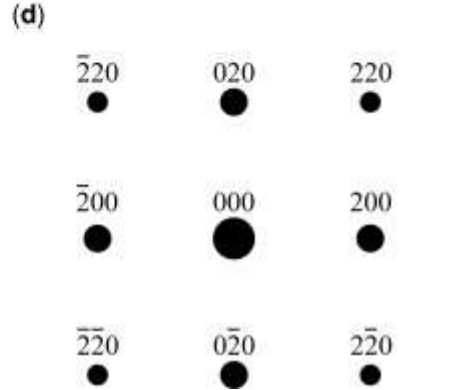
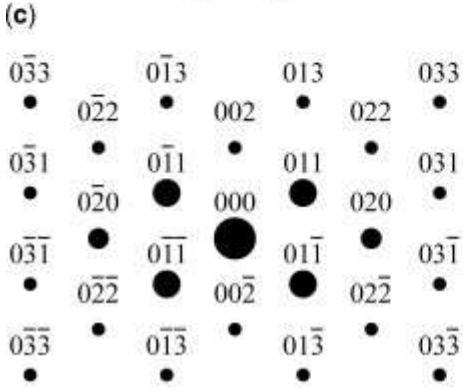
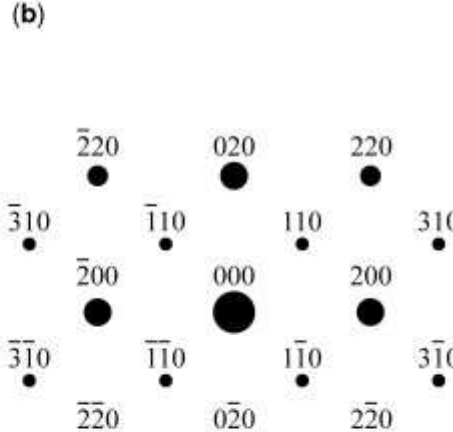
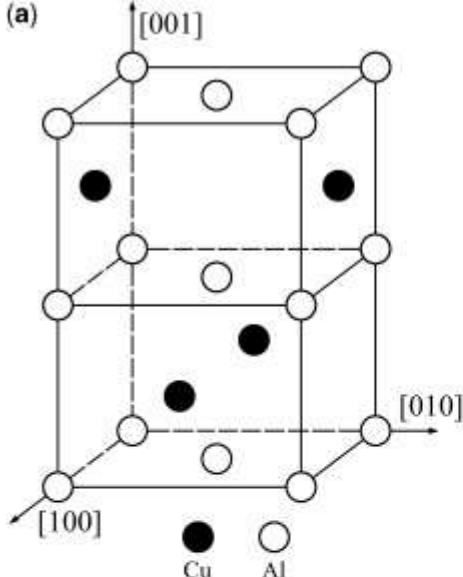
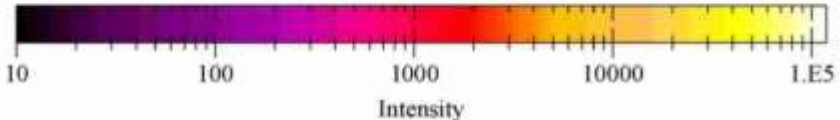
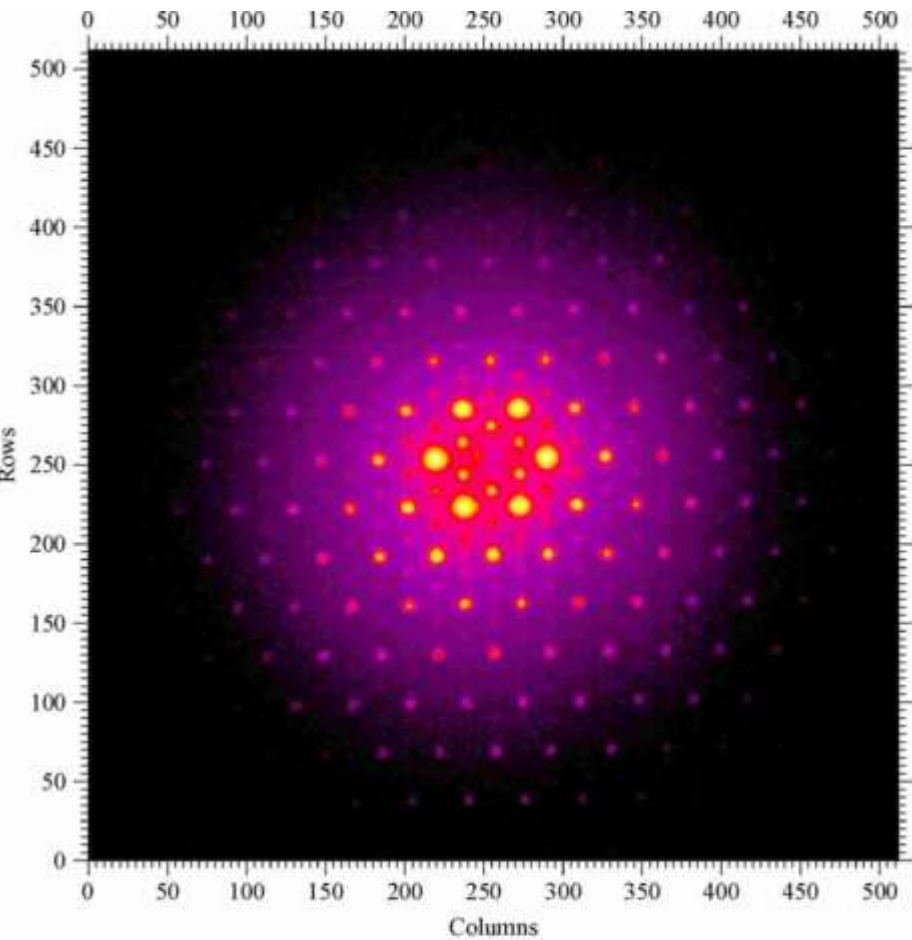
ΕΙΚΟΝΕΣ ΠΕΡΙΘΛΑΣΗΣ (Diffraction patterns) 2-D

Διδιάστατο πλέγμα

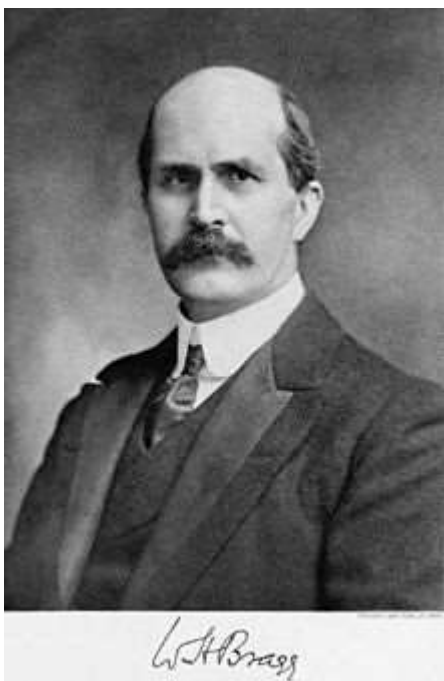


ΕΙΚΟΝΕΣ ΠΕΡΙΘΛΑΣΗΣ (Diffraction patterns)

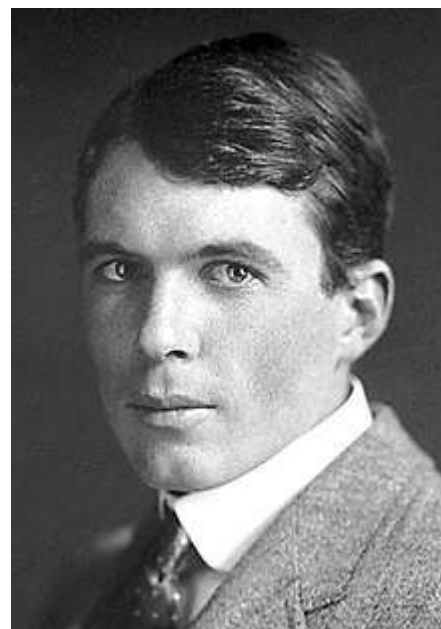
3-D



**Sir William Henry
Bragg**
Πατήρ



**Sir William
Lawrence Bragg**
Υιός

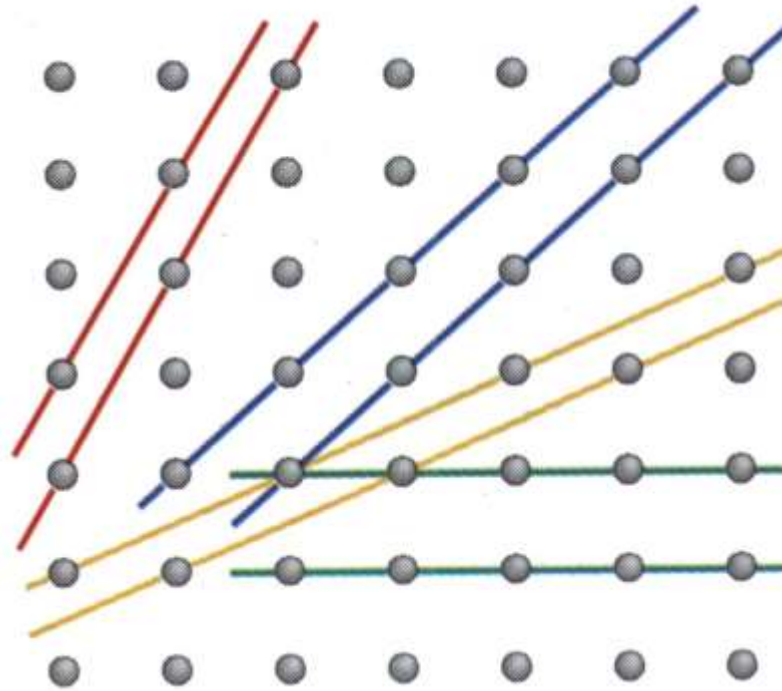


και ο **νόμος των ανακλάσεων** $2d \sin\theta_m = m\lambda$

Nobel, 1915

Νόμος των ανακλάσεων - Νόμος Bragg

Μπορούμε να φανταστούμε ότι ένα πλέγμα (έστω η απλούστερη περίπτωση με πλεγματικά σημεία που απέχουν ίση απόσταση d μεταξύ τους) αποτελείται από διάφορα σύνολα επιπέδων τα οποία διέρχονται σε διαφορετικές διευθύνσεις.

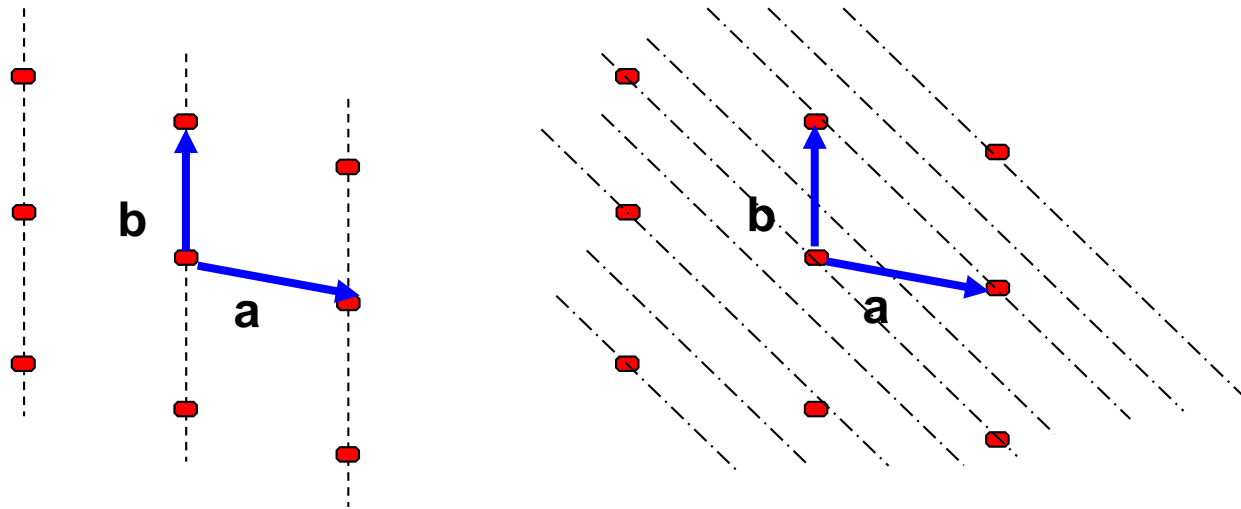


Απλουστευμένη περίπτωση ενός 2-διάστατου πλέγματος αποτελούμενο από (αντί επιπέδων) από σύνολο ευθειών διαφορετικών διευθύνσεων

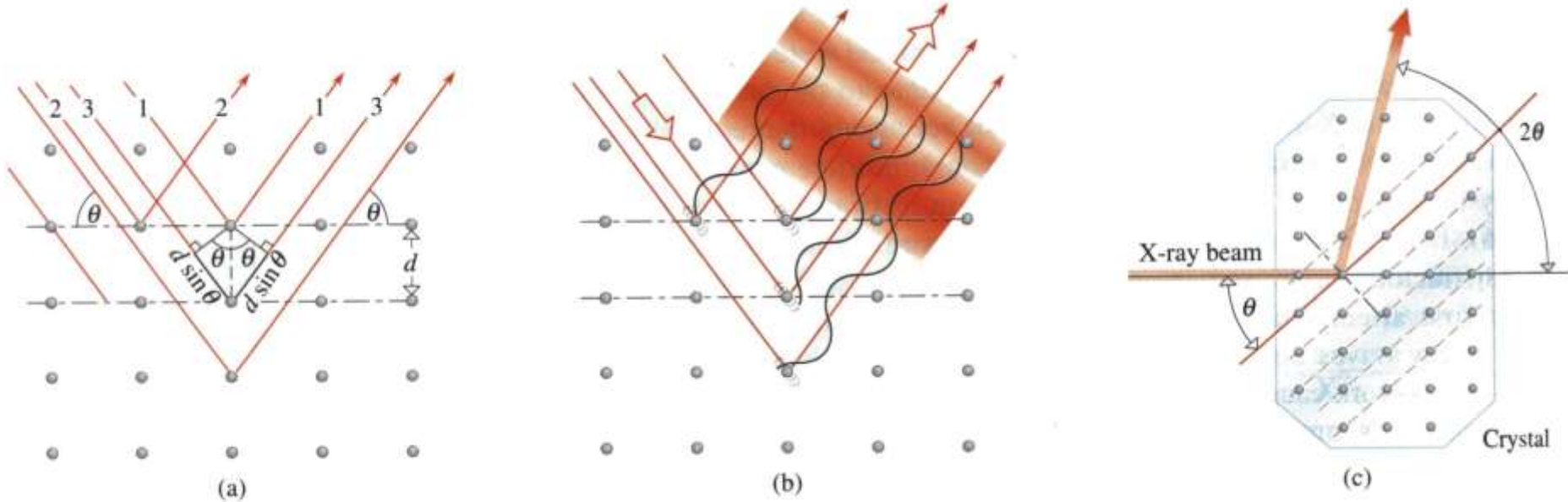
Crystal Planes

- Within a crystal lattice it is possible to identify sets of equally spaced parallel planes. These are called **lattice planes**.
- In the figure density of **lattice points on each plane of a set is the same** and all lattice points are contained on each set of planes.

The set of planes in 2D lattice.



Νόμος των ανακλάσεων - Νόμος Bragg



Ακτίνες που προσπίπτουν σε ένα τέτοιο επίπεδο (ευθεία για την περίπτωση 2-διάστατου πλέγματος) με γωνία θ ως προς αυτό, καθώς *"ανακλώνται"* θα εμφανίσουν φαινόμενα συμβολής με μέγιστο έντασης όταν η διαφορά δρόμου των δύο συμβαλλόντων κυμάτων είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του μήκους κύματος λ της ακτινοβολίας:

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

$$(n = 1, 2, 3, \dots)$$

Άσκηση

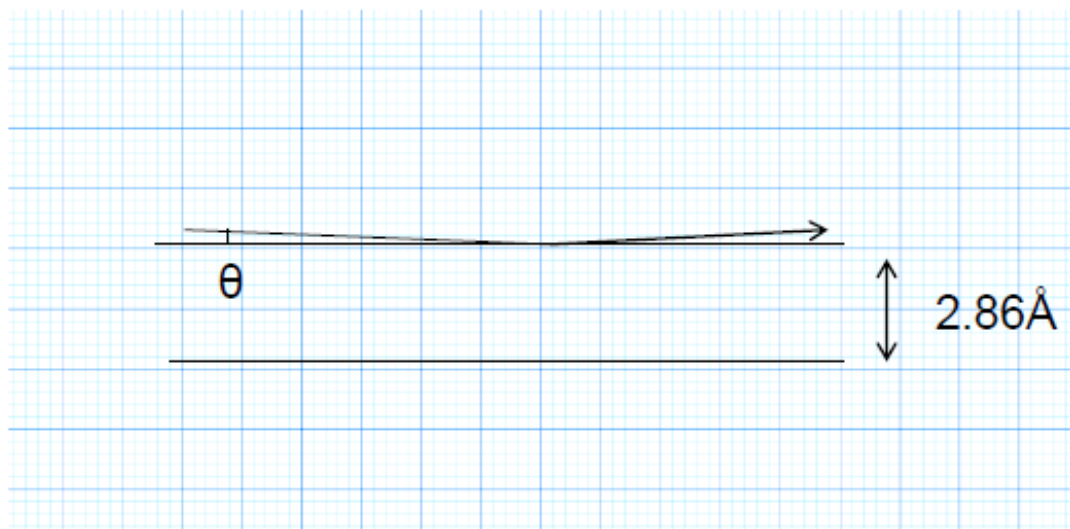
Θεωρείστε πλέγμα αποτελούμενο από άτομα που ισαπέχουν κατά 2.86\AA προς όλες τις διευθύνσεις (κυβικό πλέγμα). Εάν κρύσταλλος αυτού του υλικού ακτινοβοληθεί με ακτίνες X μήκους κύματος 0.585\AA σε ποιές γωνίες παρατηρούνται ανακλάσεις Bragg από τα επίπεδα που απέχουν $d= 2.86\text{\AA}$; (Παρατηρούνται περισσότερα από ένα σείτ ανακλάσεων αλλά δεν θα ασχοληθούμε με την πολυπλοκότητα αυτή εδώ). Σχεδιάστε σε χαρτί μιλιμετρέ το επίπεδο ab του πλέγματος και πάνω σε αυτό την πρώτη προσπίπτουσα και ανακλώμενη ακτίνα που βρίσκονται σε αυτό το επίπεδο.

Λύση

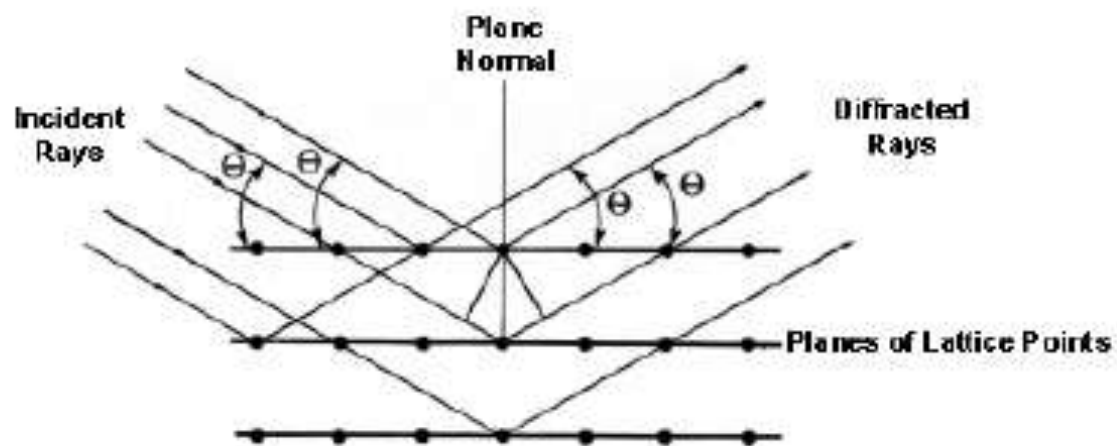
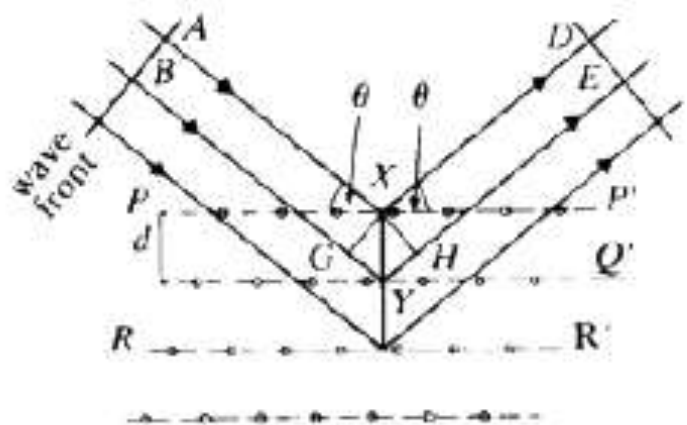
Από νόμο του Bragg $2d \sin\theta = n\lambda$ ($n=0, 1, 2, 3, \dots$) (1)

Και επειδή $\lambda=0.585\text{\AA}$ και $d=2.86\text{\AA}$ αντικαθιστώντας στην (1)

Έχουμε $2 \cdot 2.86 \cdot \sin\theta = n \cdot 0.585$ λύνοντας ως προς $\sin\theta$ προκύπτει $\sin\theta = n(0,1022)$ επειδή το n είναι ακέραιος αριθμός και επειδή το $\sin\theta$ παίρνει τιμές από $0 \leq \sin\theta \leq 1$ άρα έχουμε 9 γωνίες με $n=1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$. Άρα για $n=1$, $\theta = \sin^{-1}(0,1022) = 5,86^\circ$, για $n=2$, $\theta = \sin^{-1}(0,2044) = 11,79^\circ$ κ.ο.κ



Νόμος Bragg: $2 d \sin \theta = n \lambda$

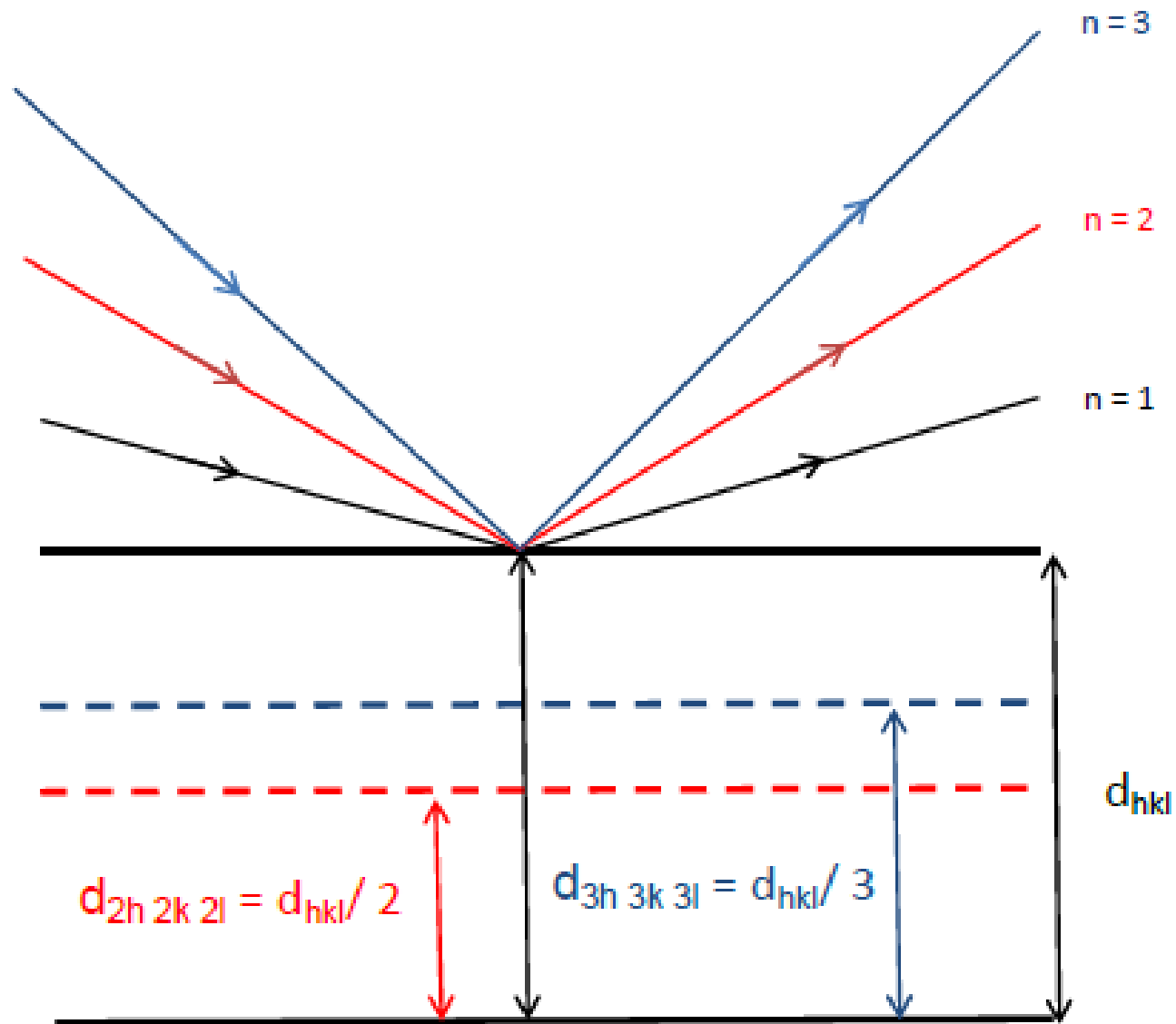


Εάν ο νόμος Bragg ικανοποιείται για τα δύο πρώτα επίπεδα ικανοποιείται και για όλα τα άλλα της οικογένειας hkl που ισαπέχουν κατά d, αφού όλες οι ανακλώμενες από αυτά ακτίνες θα είναι σε συμφωνία φάσης.

Τάξη ανάκλασης

Το n ορίζει την τάξη της ανάκλασης από την οικογένεια επιπέδων hkl .

Ο νόμος Bragg μπορεί να γραφεί ως: $2 (d/n) \sin \theta = \lambda$.

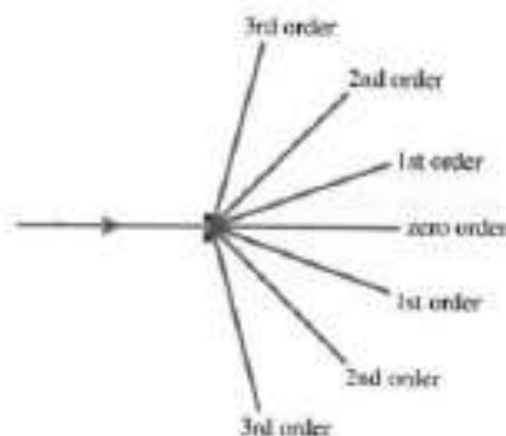
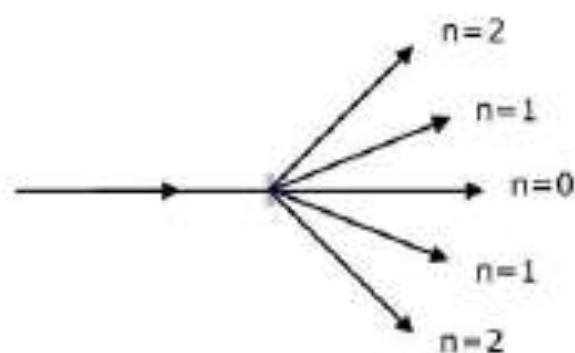


Η ανάκλαση Bragg τάξης n από μια οικογένεια πλεγματοειδών επιπέδων hkl (ή αλλιώς απλά η τάξη n) είναι ΙΣΟΔΥΝΑΜΗ με ανάκλαση 1^{ης} τάξης ($n = 1$) από μια οικογένεια «φανταστικών» επιπέδων $nh nk nl$, παραλλήλων στα επίπεδα hkl , που βρίσκονται σε απόσταση μεταξύ τους:

$$d_{nh nk nl} = d_{hkl} / n$$

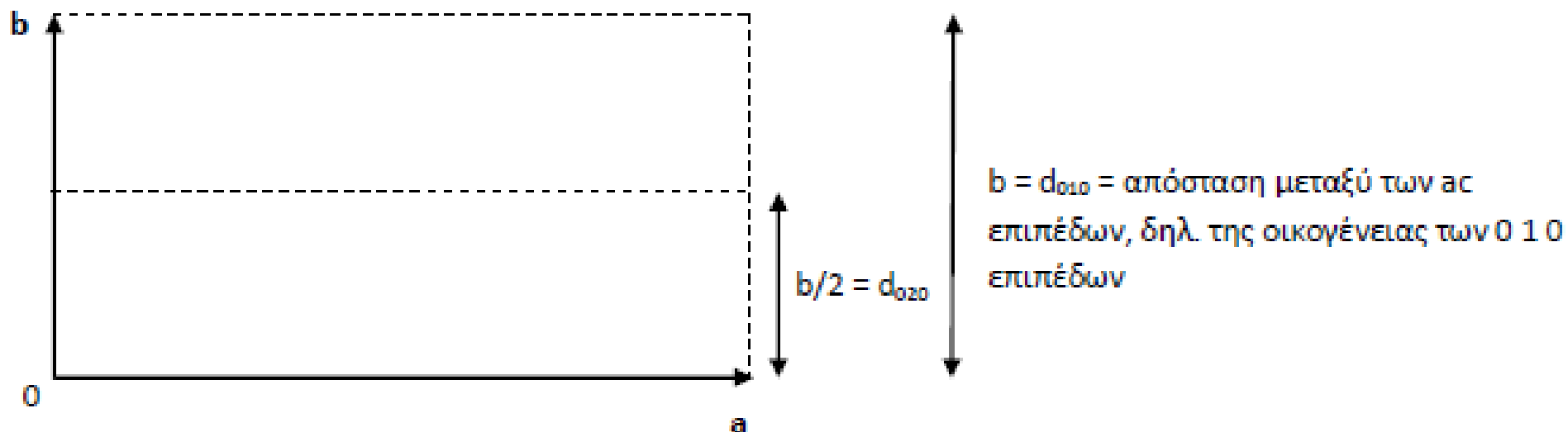
Με τον τρόπο αυτό μπορούμε να φανταζόμαστε τις ανακλάσεις Bragg μεγαλύτερης τάξης ($n = 2, 3, 4, \dots$) ως 1^{ης} τάξης ανακλάσεις προερχόμενες από επίπεδα με μικρότερη μεταξύ τους απόσταση που αντιστοιχούν σε λεπτότερη διαμέριση του κρυστάλλου (από αυτήν επιπέδων του κρυσταλλικού πλέγματος) και επομένως δίνουν υψηλότερη ευκρίνεια της κρυσταλλικής δομής.

Τα επίπεδα αυτά (ή οι μεγαλύτερης τάξης ανακλάσεις Bragg) θα αντιστοιχούν σε δείκτες Miller πολλαπλάσιους των hkl (κατά n) και επομένως σε σημεία του αντίστροφου πλέγματος περισσότερο απομακρυσμένα από την αρχή του.



Παράδειγμα

Έστω η προβολή κατά τον άξονα c , μοναδιαίας κυψελίδας ορθορομβικού κρυσταλλικού συστήματος:



1ης τάξη ανάκλαση Bragg, $n = 1$, στο επίπεδο 010 :

$$2d_{010} \sin\theta = \lambda \Leftrightarrow 2b \sin\theta = \lambda$$

2ης τάξη ανάκλαση Bragg, $n = 2$ στο επίπεδο 010 :

$$2d_{010} \sin\theta = 2\lambda \Leftrightarrow 2b \sin\theta = 2\lambda \Leftrightarrow 2(b/2) \sin\theta = \lambda \Leftrightarrow 2d_{020} \sin\theta = \lambda \text{ (1ης τάξη ανάκλαση Bragg, } n = 1, \text{ στο επίπεδο } 020)$$

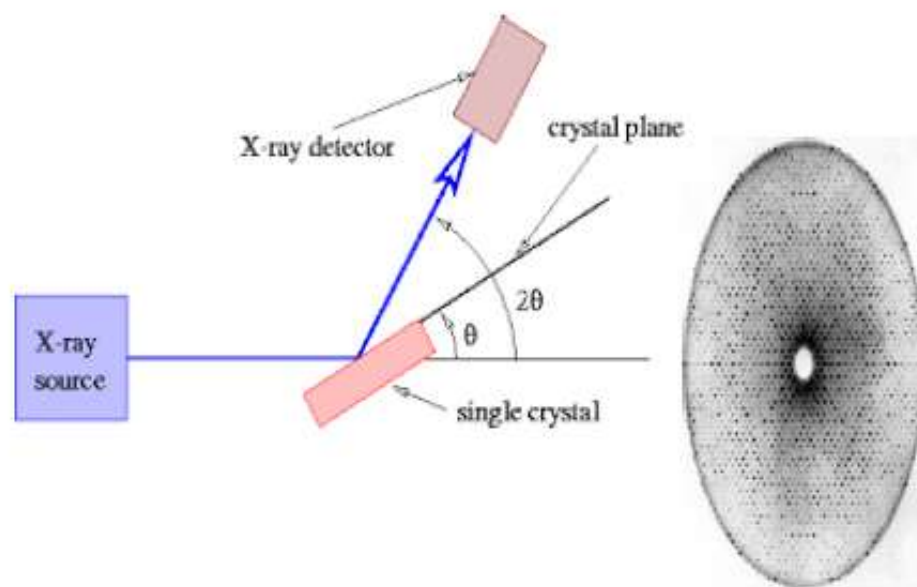
3ης τάξη ανάκλαση Bragg, $n = 3$:

$$2d_{010} \sin\theta = 3\lambda \Leftrightarrow 2b \sin\theta = 3\lambda \Leftrightarrow 2(b/3) \sin\theta = \lambda \Leftrightarrow 2d_{030} \sin\theta = \lambda \text{ (1ης τάξη ανάκλαση Bragg, } n = 1, \text{ στο επίπεδο } 030)$$

...

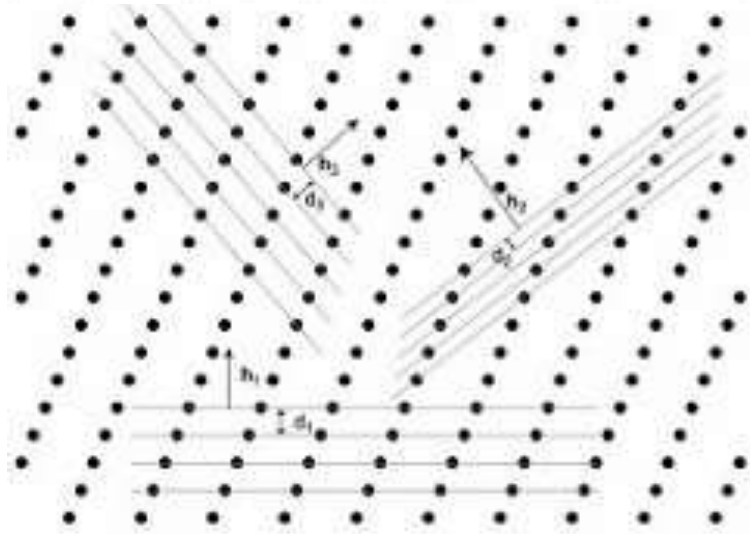
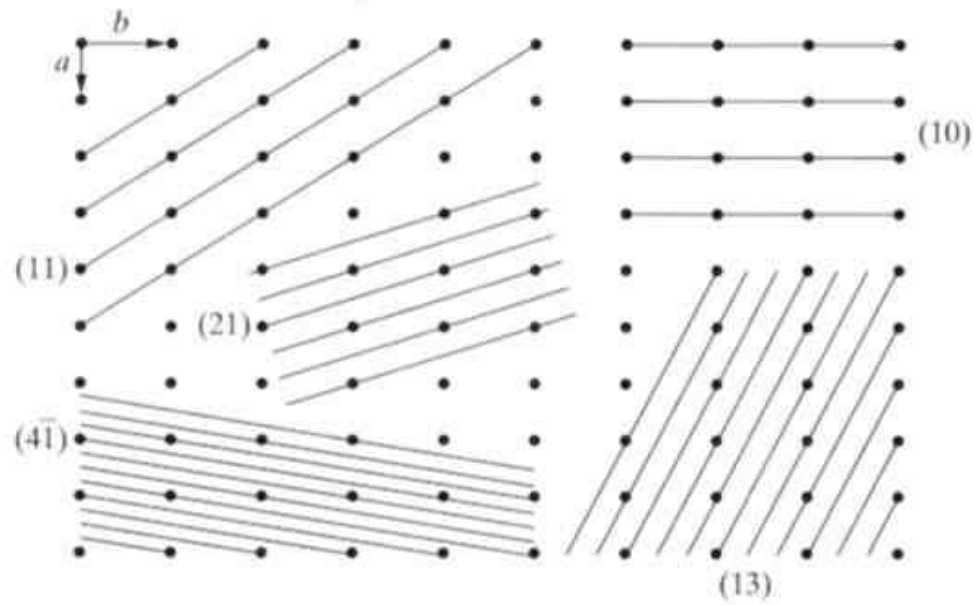
Περίθλαση ακτίνων-Χ από κρυστάλλους

Μια τυπική διάταξη του πειράματος περίθλασης φαίνεται στο παρακάτω σχήμα :



Προκύπτει με απλή γεωμετρία ότι η γωνία της προσπίπτουσας δέσμης με την σκεδαζόμενη δέσμη είναι 2θ .

ΑΝΑΓΝΩΡΙΣΗ – ΟΝΟΜΑΣΙΑ (ΔΕΙΚΤΙΟΔΟΤΗΣΗ) ΕΠΙΠΕΔΩΝ Bragg



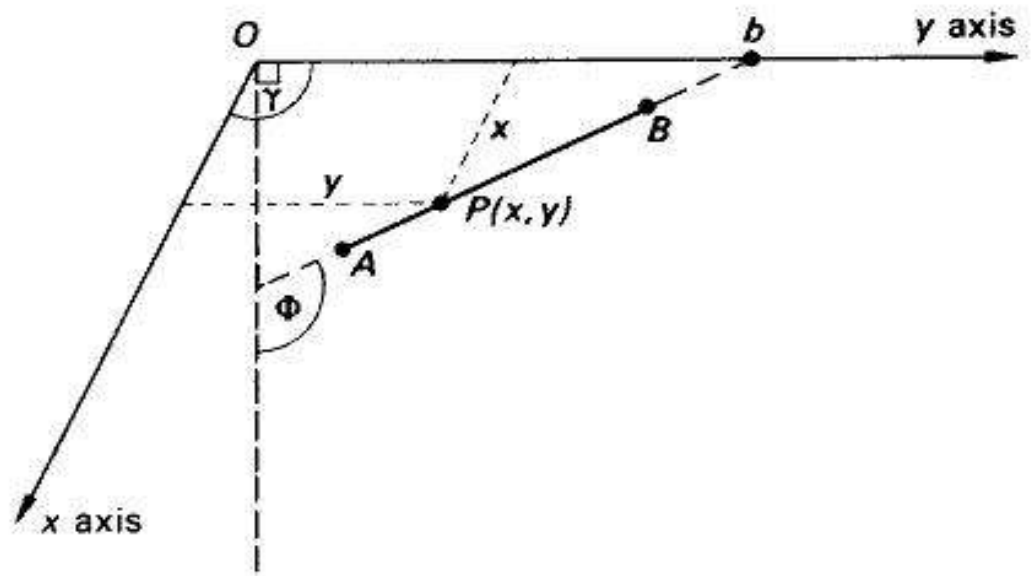
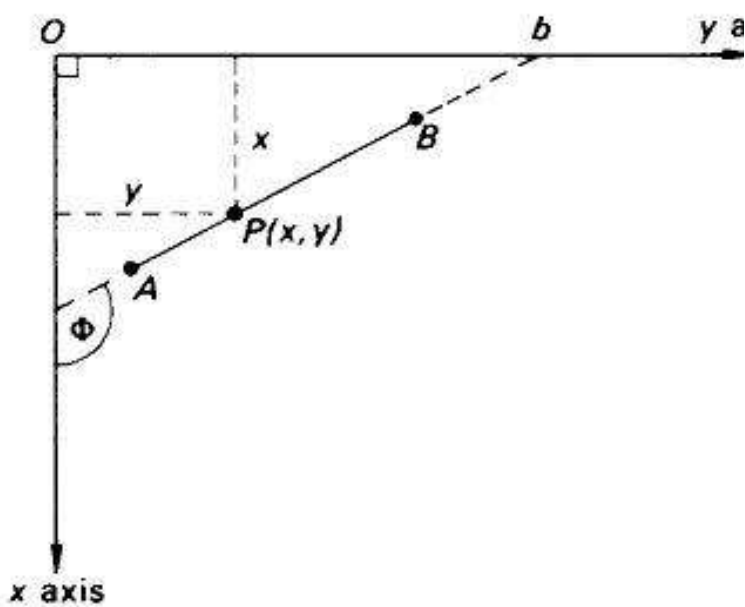
- Μια ευθεία περιγράφεται από μια εξίσωση της μορφής:

$$Y = M \cdot X + b$$

$$M = \tan \Phi$$

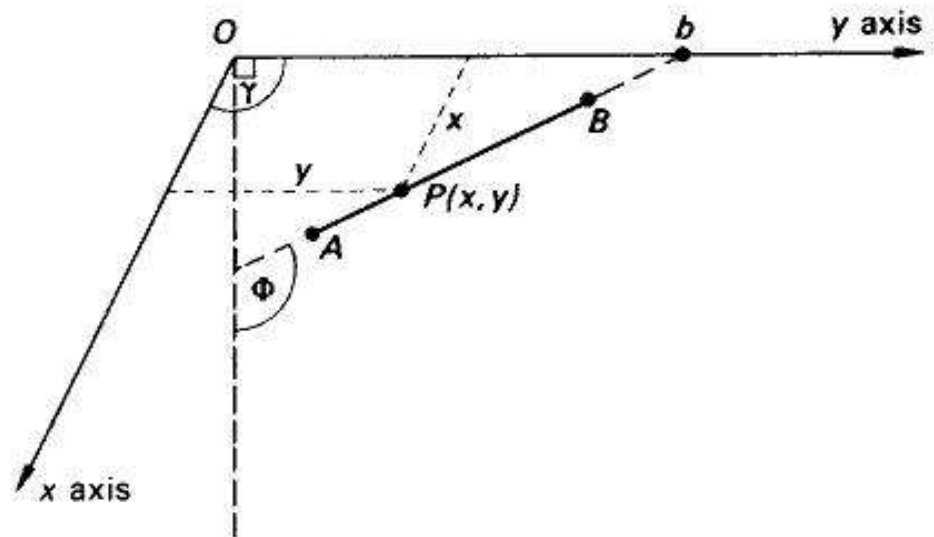
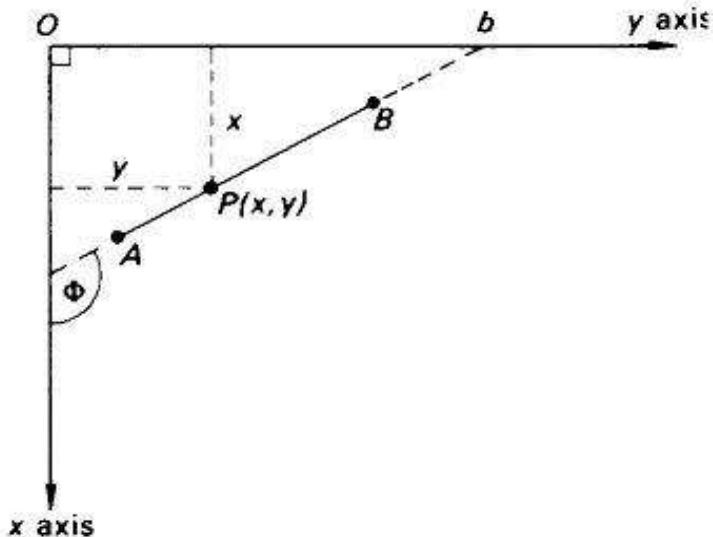
$$Y = M \cdot X + b$$

$$M = \tan \Phi \cdot \sin \gamma - \cos \gamma$$



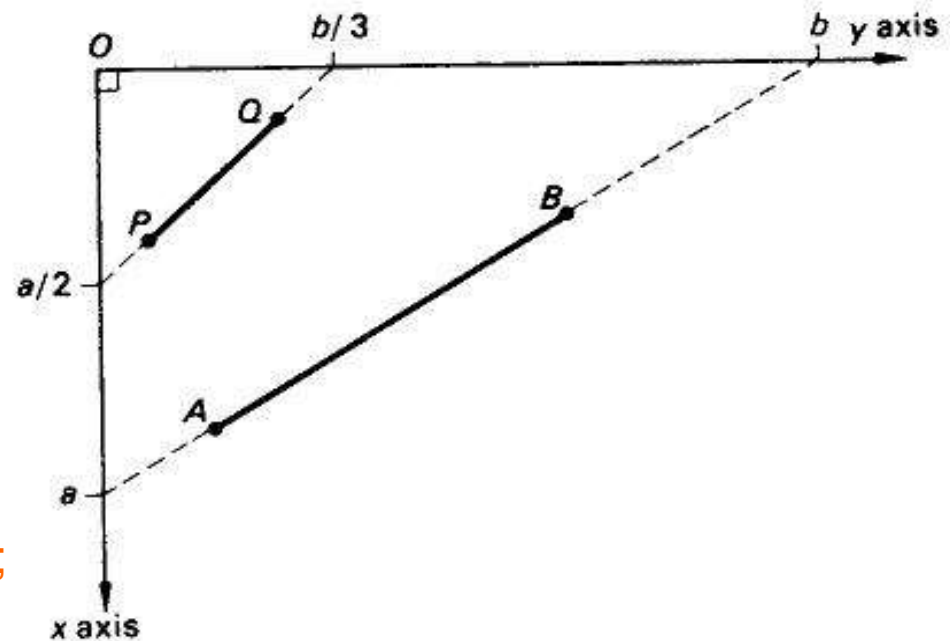
- Η προηγούμενη περιγραφή (αναλυτική) εξαρτάται από το σύστημα που χρησιμοποιούμε. Μπορούμε να περάσουμε στην περιγραφή μιας ευθείας χρησιμοποιώντας τις επί τη αρχή συντεταγμένες που έχει τη μορφή:

$$\frac{X}{a} + \frac{Y}{b} = 1 \quad \text{και για τα δύο συστήματα.}$$



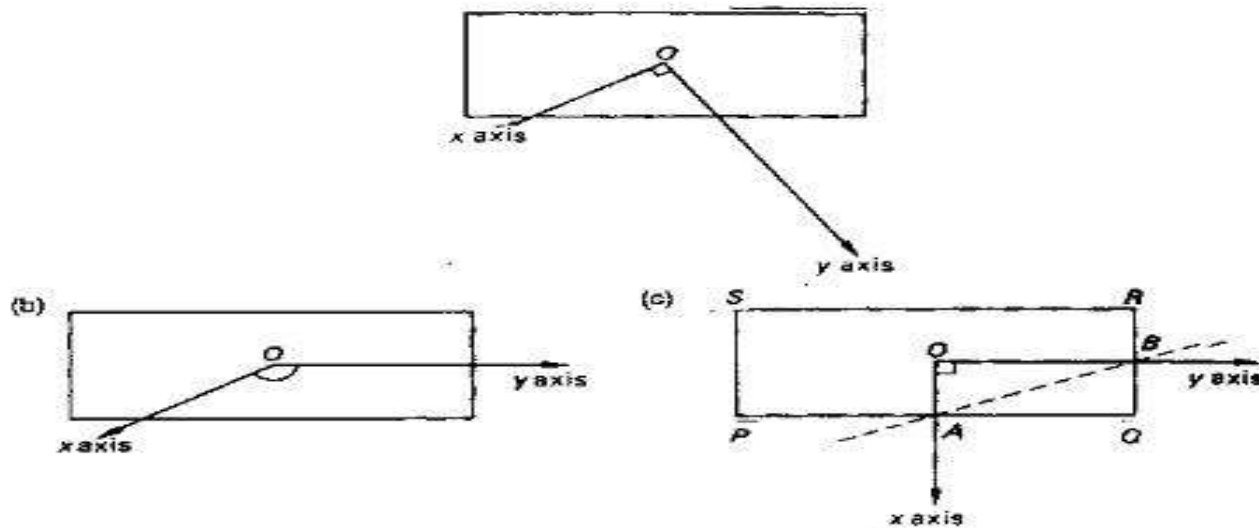
- Αν περιγράψουμε με τον προηγούμενο τρόπο μια ευθεία AB τότε οποιαδήποτε άλλη ευθεία PQ μπορεί να περιγραφεί ως εξής:
 - 1) Η ευθεία PQ τέμνει τους άξονες στα σημεία $a/2$ και $b/3$.
 - 2) Θα περιγράψουμε την ευθεία PQ με τους αριθμούς

$$(h \ k) = \begin{pmatrix} \frac{a}{2} & \frac{b}{3} \\ \frac{a}{2} & \frac{b}{3} \end{pmatrix} = (2 \ 3)$$



Ποιοι αριθμοί περιγράφουν την AB;

- Το σύστημα των αξόνων που θα χρησιμοποιήσουμε εξαρτάται κάθε φορά από τις ευθείες που πρέπει να περιγράψουμε.
- Ποιο σύστημα αξόνων νομίζετε ότι θα χρησιμοποιήσουμε για να περιγράψουμε τις ευθείες ενός ορθογωνίου;



Ποιοι αριθμοί περιγράφουν τις PQ , RQ , SP , SR ;

Miller Indices

Miller Indices are a symbolic vector representation for the orientation of an atomic plane in a crystal lattice and are defined as the reciprocals of the fractional intercepts which the plane makes with the crystallographic axes.

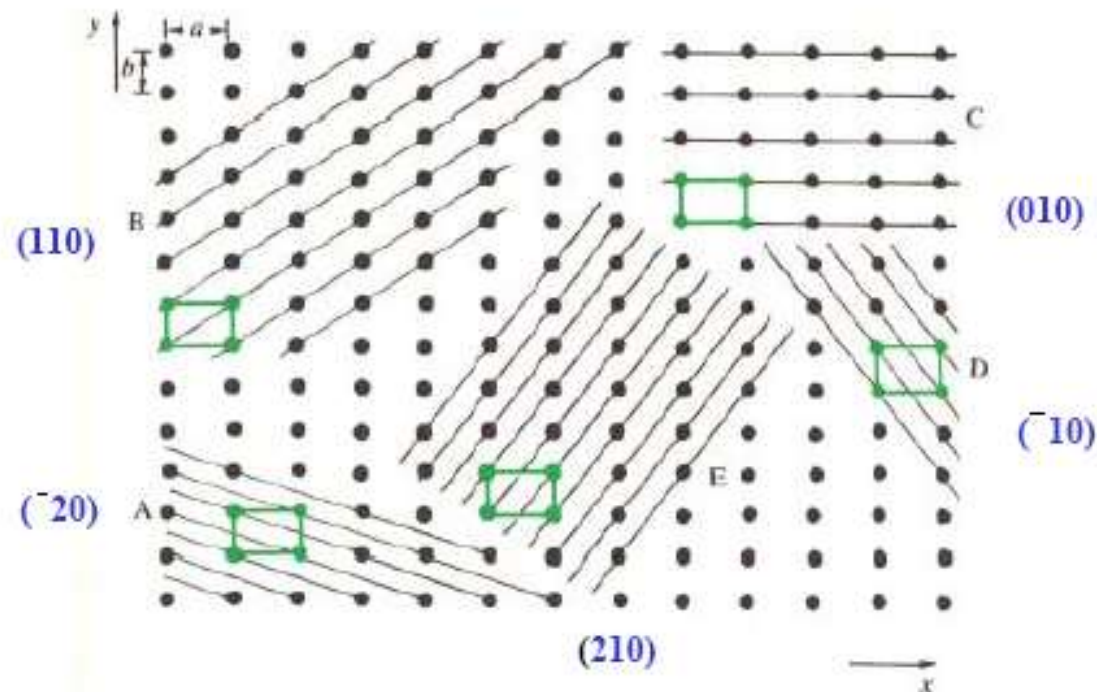
To determine Miller indices of a plane, take the following steps;

- 1) Determine the intercepts of the plane along each of the three crystallographic directions
- 2) Take the reciprocals of the intercepts
- 3) If fractions result, multiply each by the denominator of the smallest fraction

7.1.4 Crystal Planes and Miller Indices

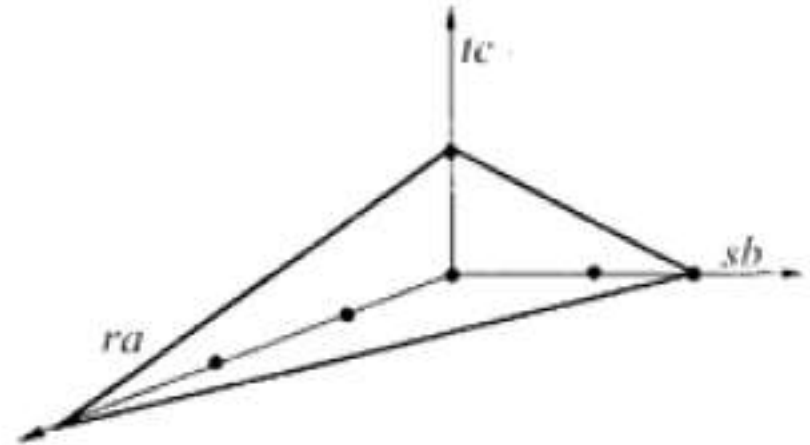
a. Lattice planes

It is possible to describe certain directions and planes with respect to the crystal lattice using a set of three integers referred to as **Miller Indices**. **Miller indices** describe the orientation and spacing of a family of planes.



b. Miller indices (hkl)

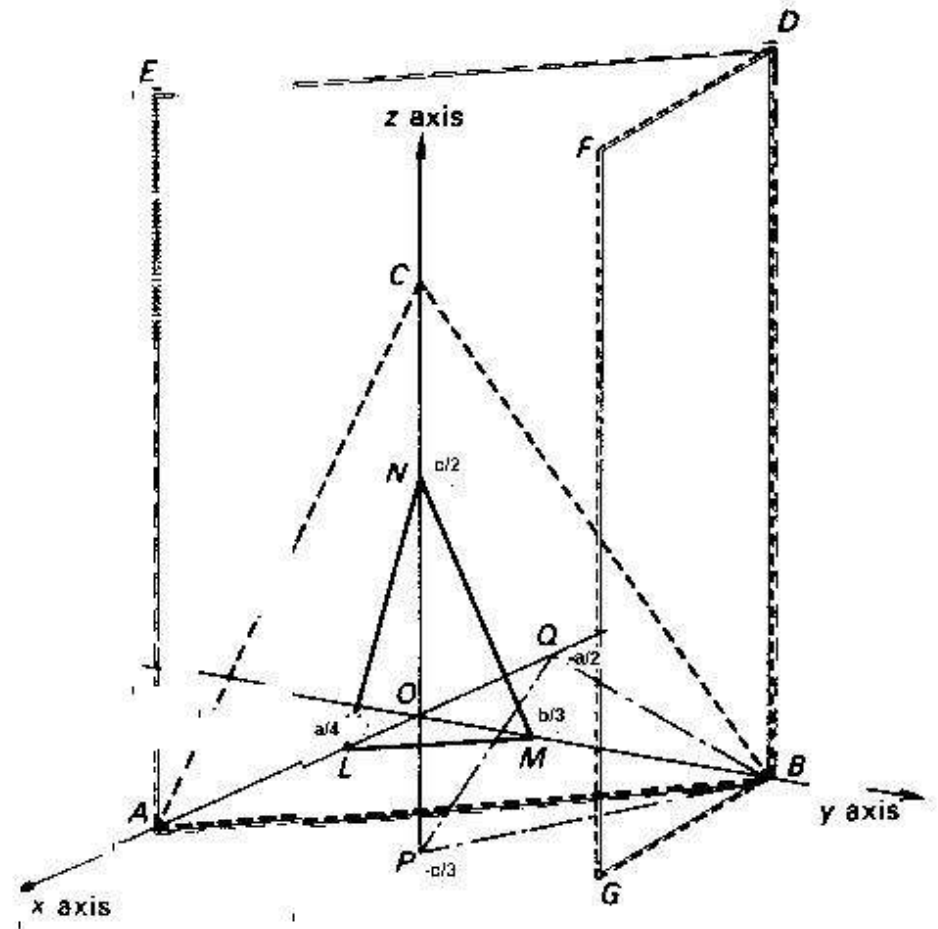
Miller indices are the reciprocal intercepts of the plane on the unit cell axes.



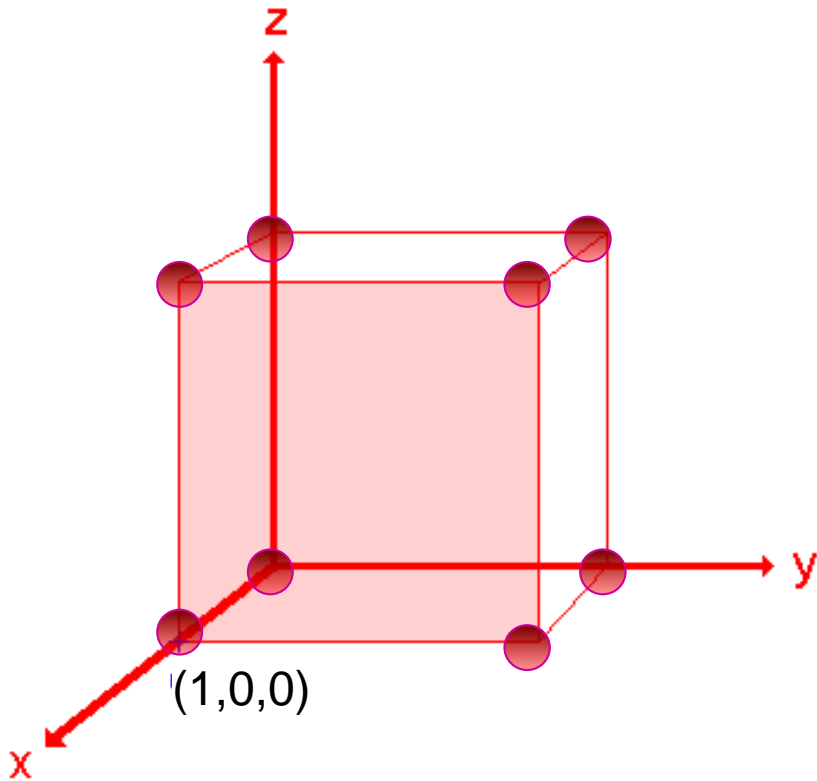
$$\frac{1}{r} : \frac{1}{s} : \frac{1}{t} = h : k : l$$

- Μπορούμε να γενικεύσουμε την προηγούμενη ιδέα προκειμένου να περιγράψουμε επίπεδα.

- 1) Επίπεδο ABC: (111).
 - 2) Επίπεδο LMN (432).
 - 3) Επίπεδο ABDE (110).
 - 4) Επίπεδο FDBG ($\bar{0}10$).
 - 5) Επίπεδο QPB ($\bar{2}13$)
- Οι αριθμοί αυτοί ονομάζονται δείκτες Miller.

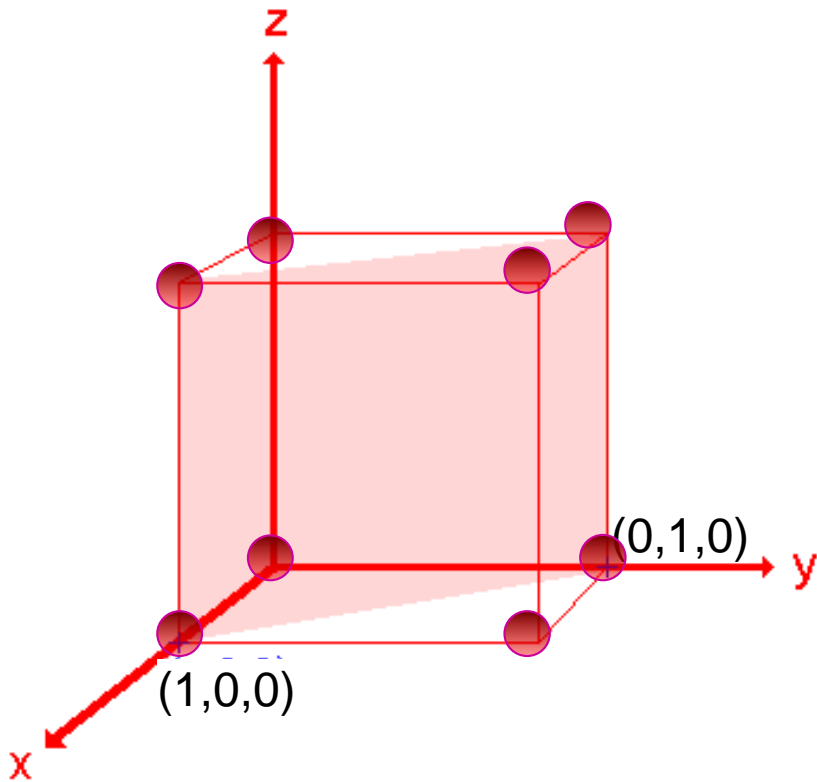


Example-1



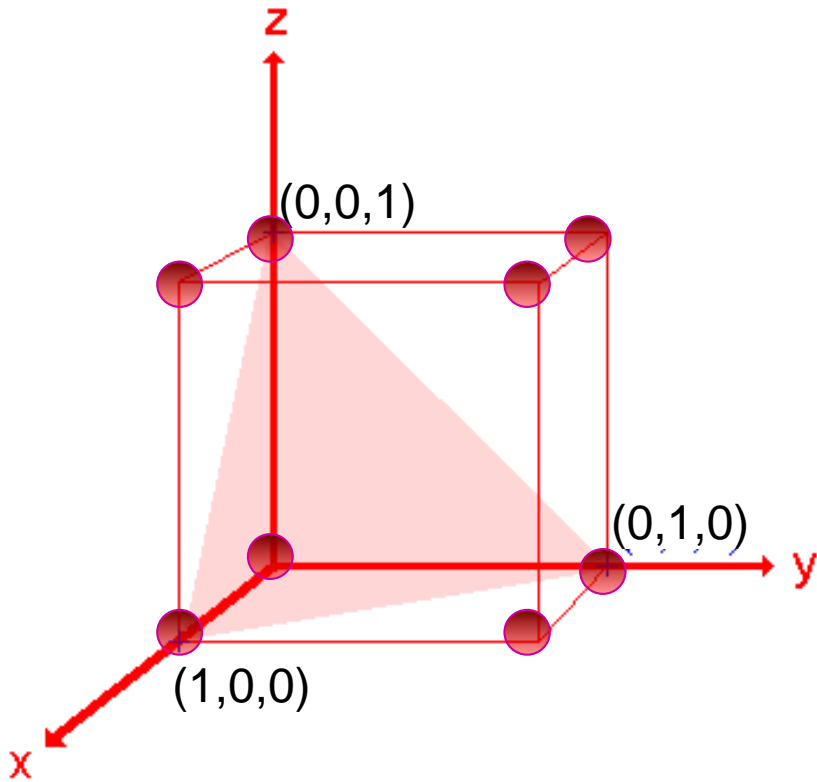
Axis	X	Y	Z
Intercept points	1	∞	∞
Reciprocals	1/1	1/ ∞	1/ ∞
Smallest Ratio	1	0	0
Miller Indices (100)			

Example-2



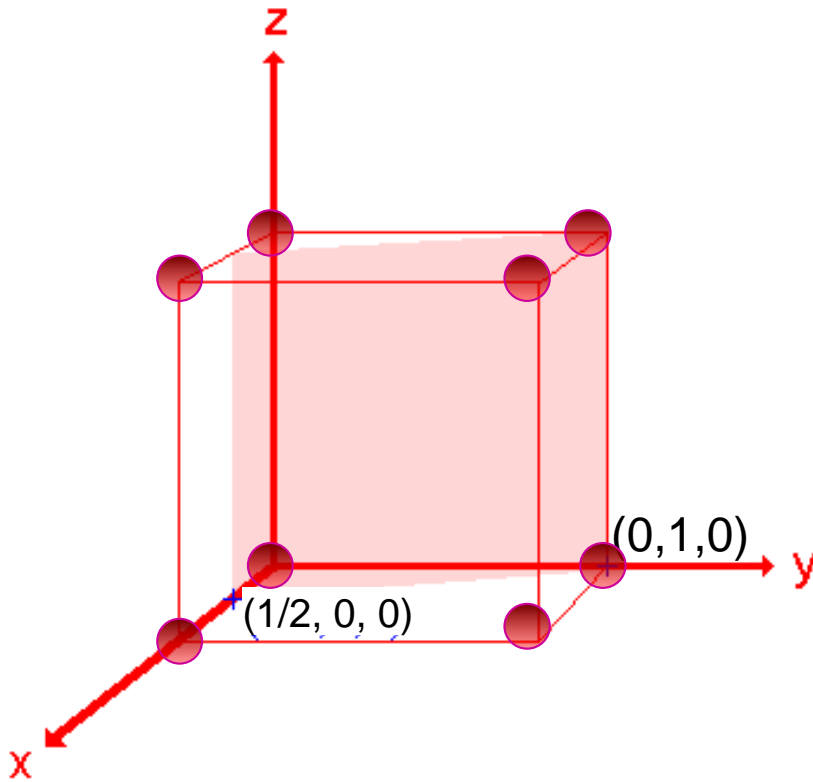
Axis	X	Y	Z
Intercept points	1	1	∞
Reciprocals	1/1	1/1	1/ ∞
Smallest Ratio	1	1	0
Miller Indices (110)			

Example-3



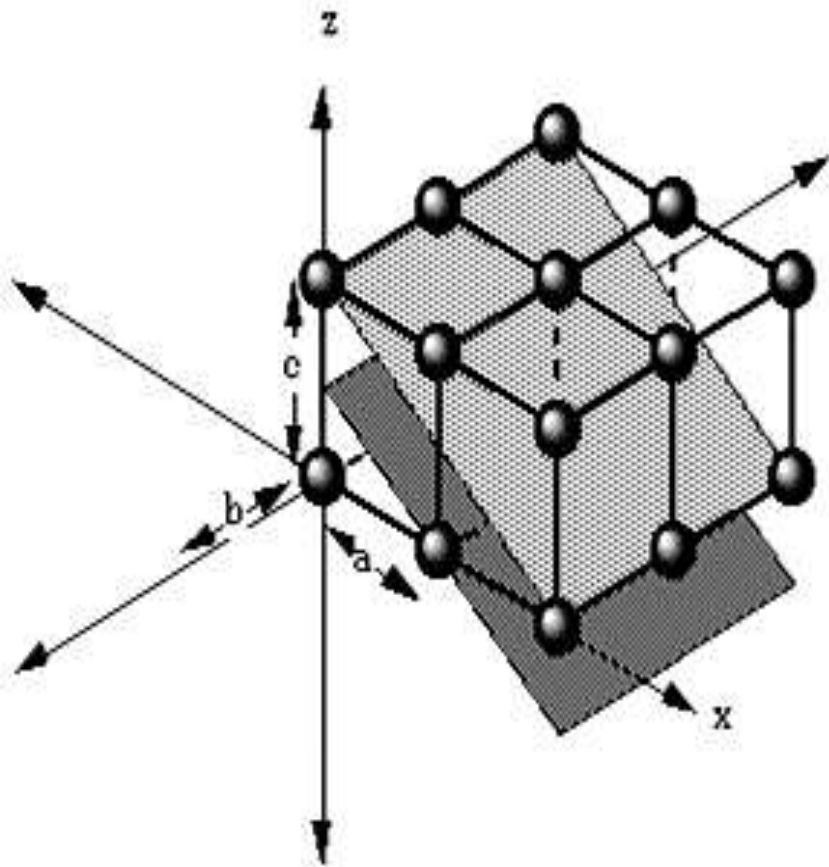
Axis	X	Y	Z
Intercept points	1	1	1
Reciprocals	1/1	1/1	1/1
Smallest Ratio	1	1	1
Miller indices (111)			

Example-4



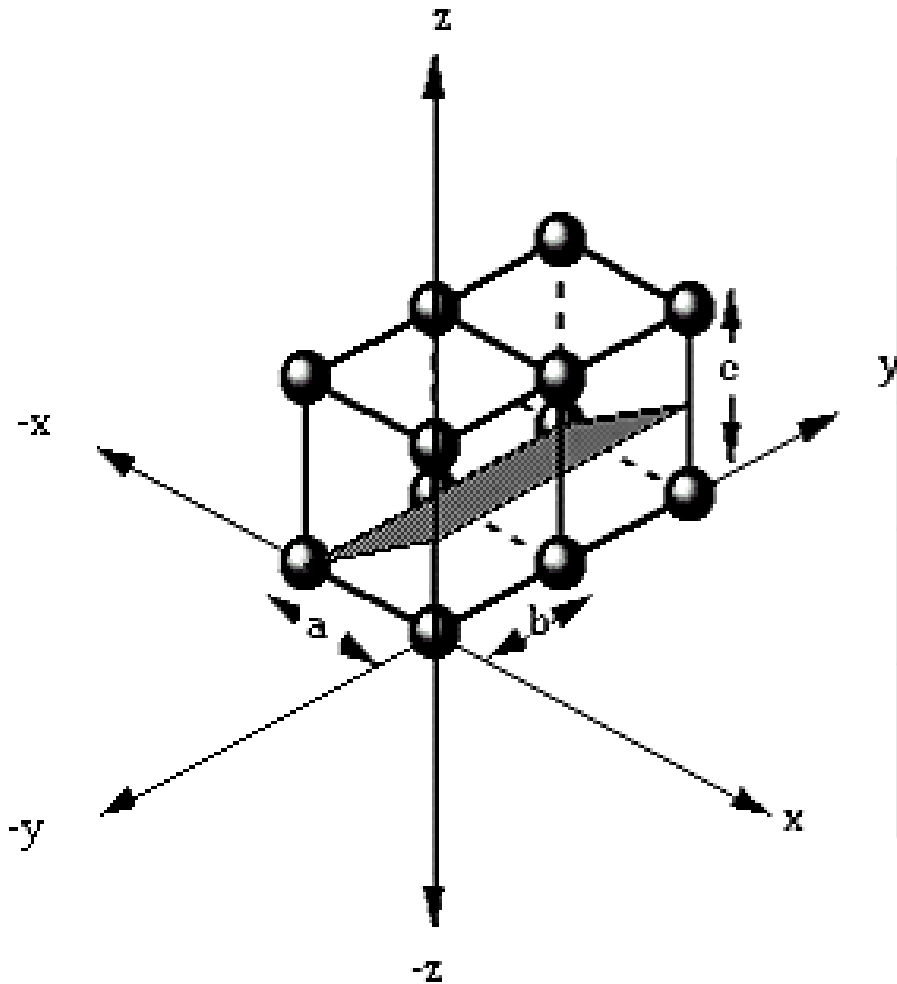
Axis	X	Y	Z
Intercept points	1/2	1	∞
Reciprocals	1/(1/2)	1/ 1	1/ ∞
Smallest Ratio	2	1	0
Miller Indices (210)			

Example-5



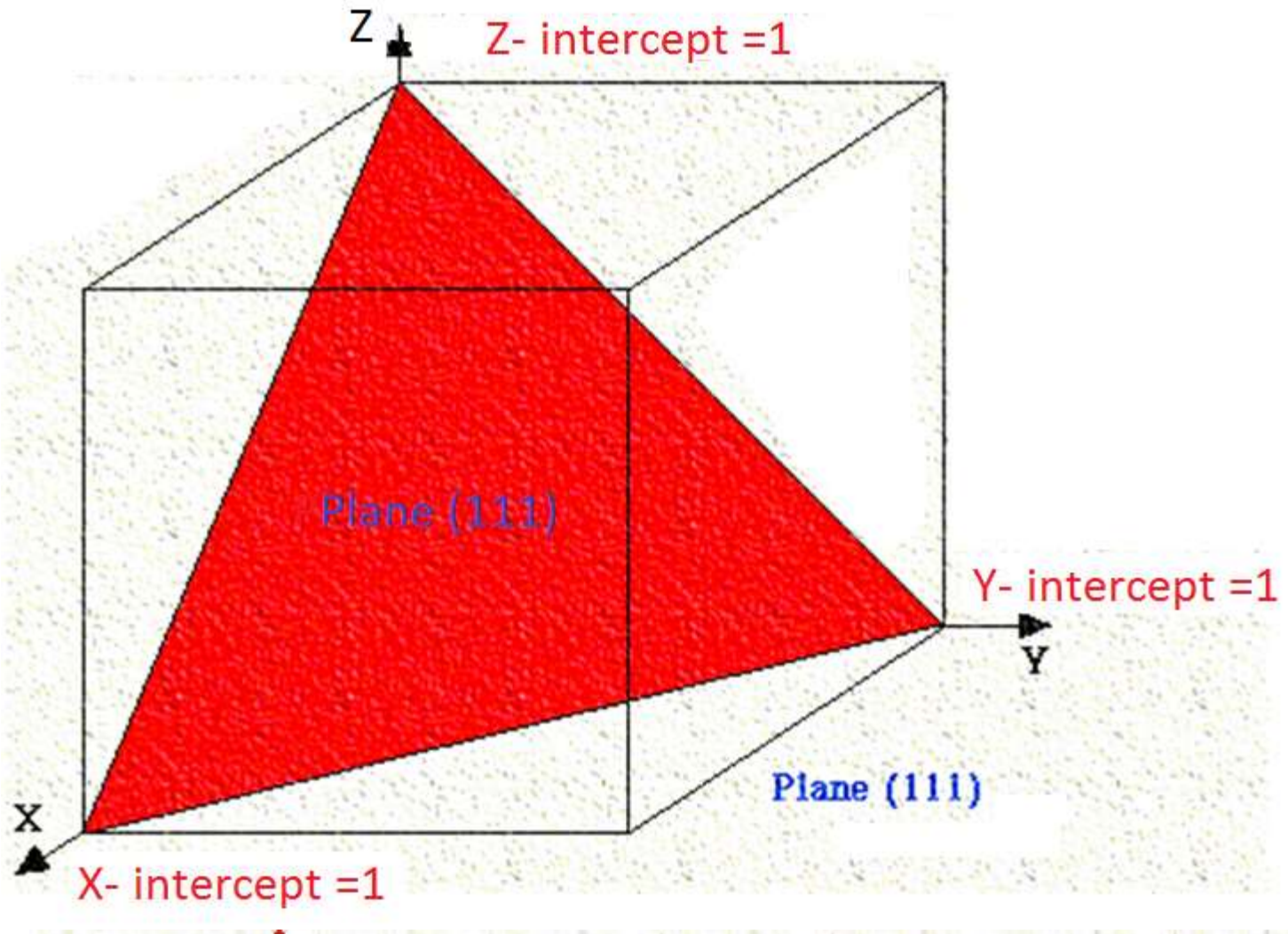
Axis	a	b	c
Intercept points	1	∞	$\frac{1}{2}$
Reciprocals	1/1	1/ ∞	1/($\frac{1}{2}$)
Smallest Ratio	1	0	2
Miller Indices (102)			

Example-6



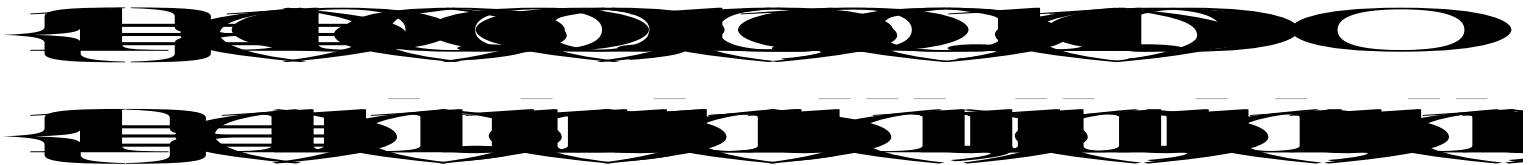
Axis	a	b	c
Intercept points	-1	∞	$1/2$
Reciprocals	$1/-1$	$1/\infty$	$1/(1/2)$
Smallest Ratio	-1	0	2
Miller indices	$(\bar{1}02)$		

Example-7



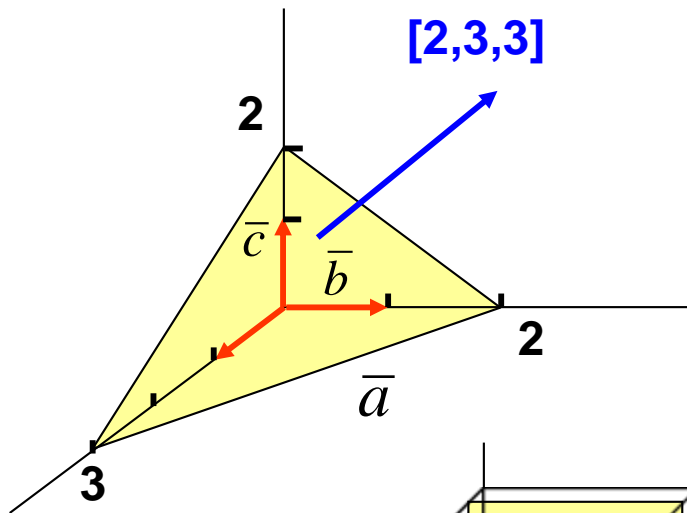
Indices of a Family or Form

- Sometimes when the unit cell has rotational symmetry, several nonparallel planes may be equivalent by virtue of this symmetry, in which case it is convenient to lump all these planes in the same Miller Indices, but with curly brackets.



Thus indices $\{h,k,l\}$ represent all the planes equivalent to the plane (hkl) through rotational symmetry.

Miller Indices

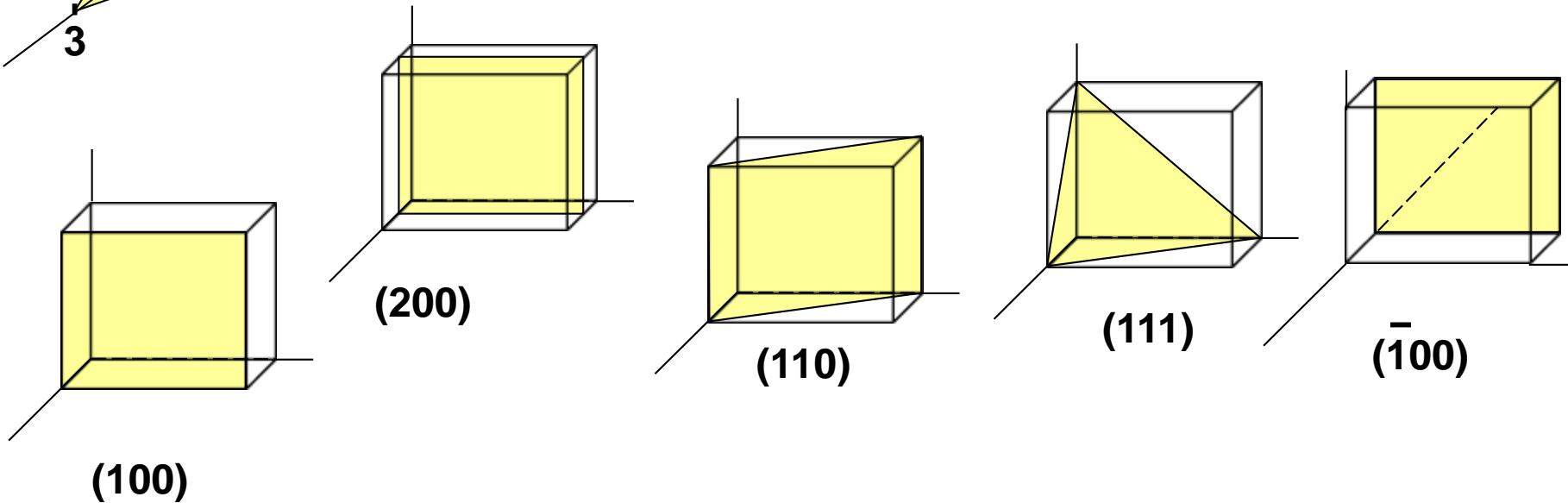


Plane intercepts axes at $3\bar{a}, 2\bar{b}, 2\bar{c}$

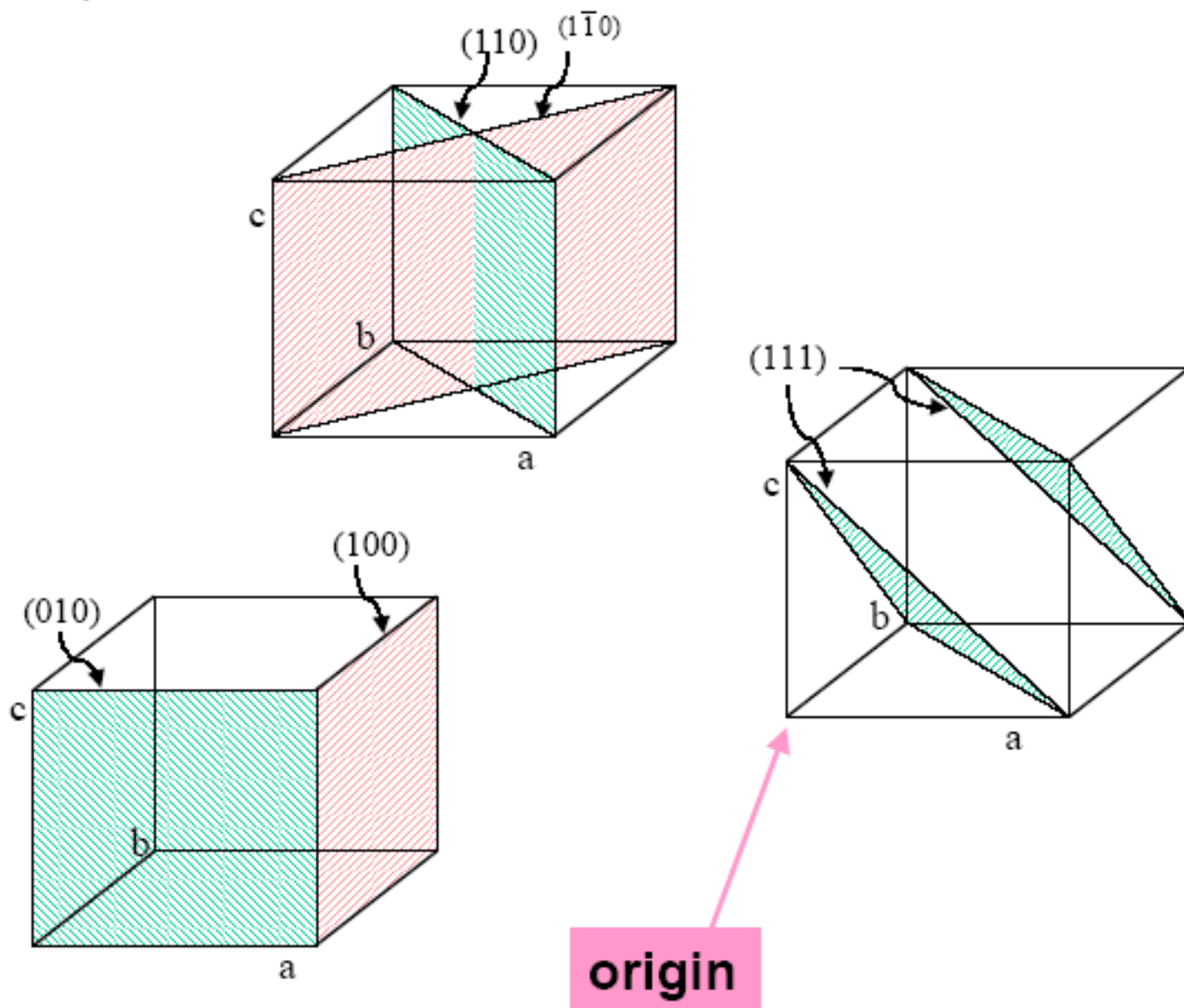
Reciprocal numbers are: $\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

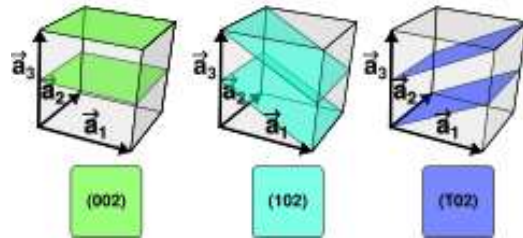
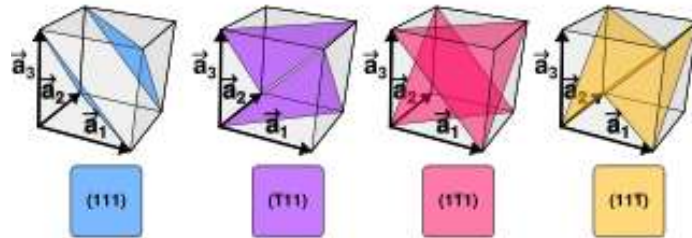
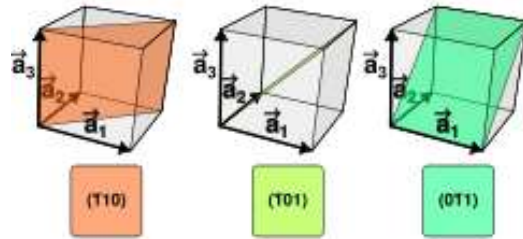
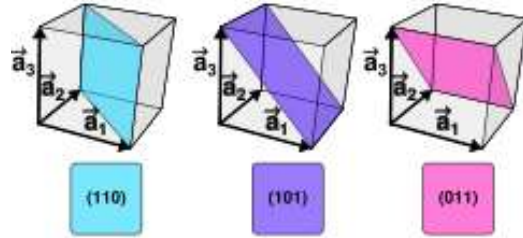
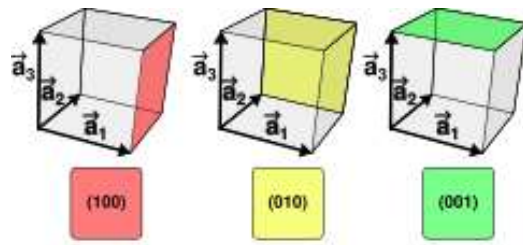
Indices of the plane (Miller): $(2,3,3)$

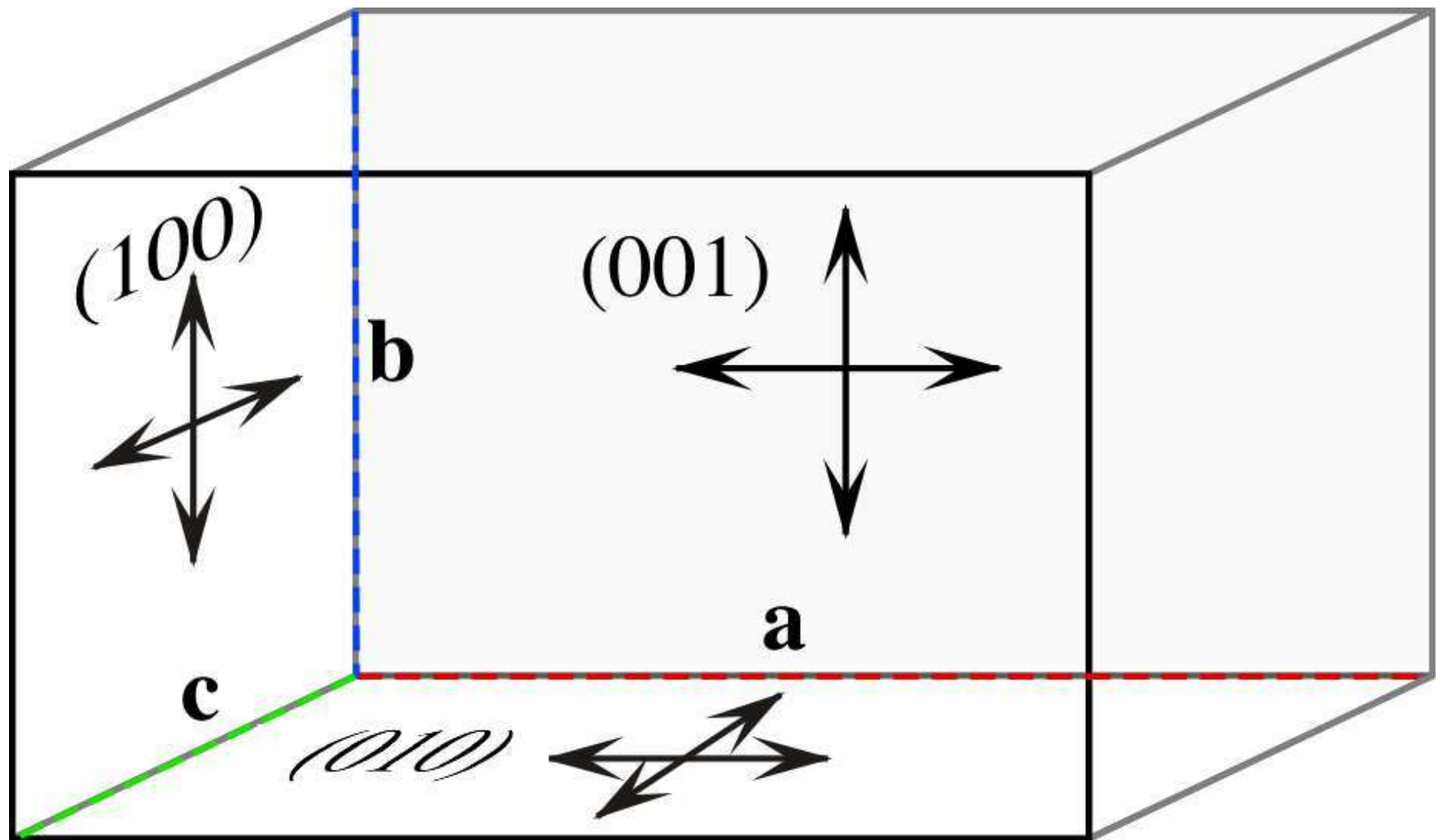
Indices of the direction: $[2,3,3]$



Examples of Miller indices



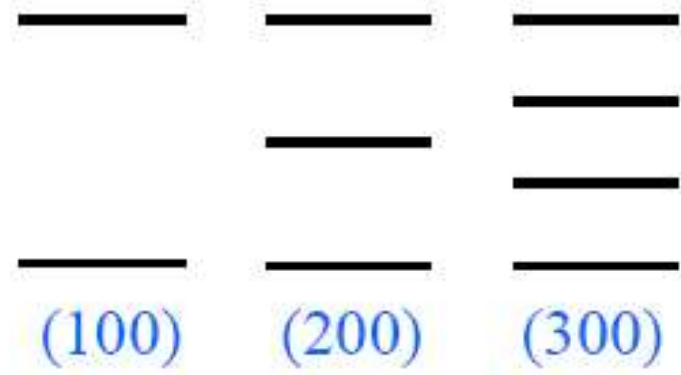




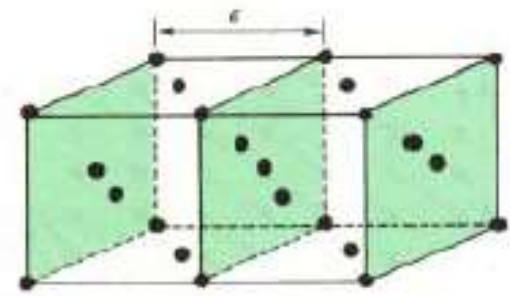
diffraction
crystal planes -
(100), (200), ...

Families of planes

Lattice plane
directions-(100)

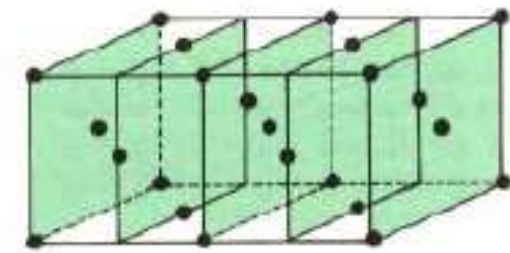


(100)

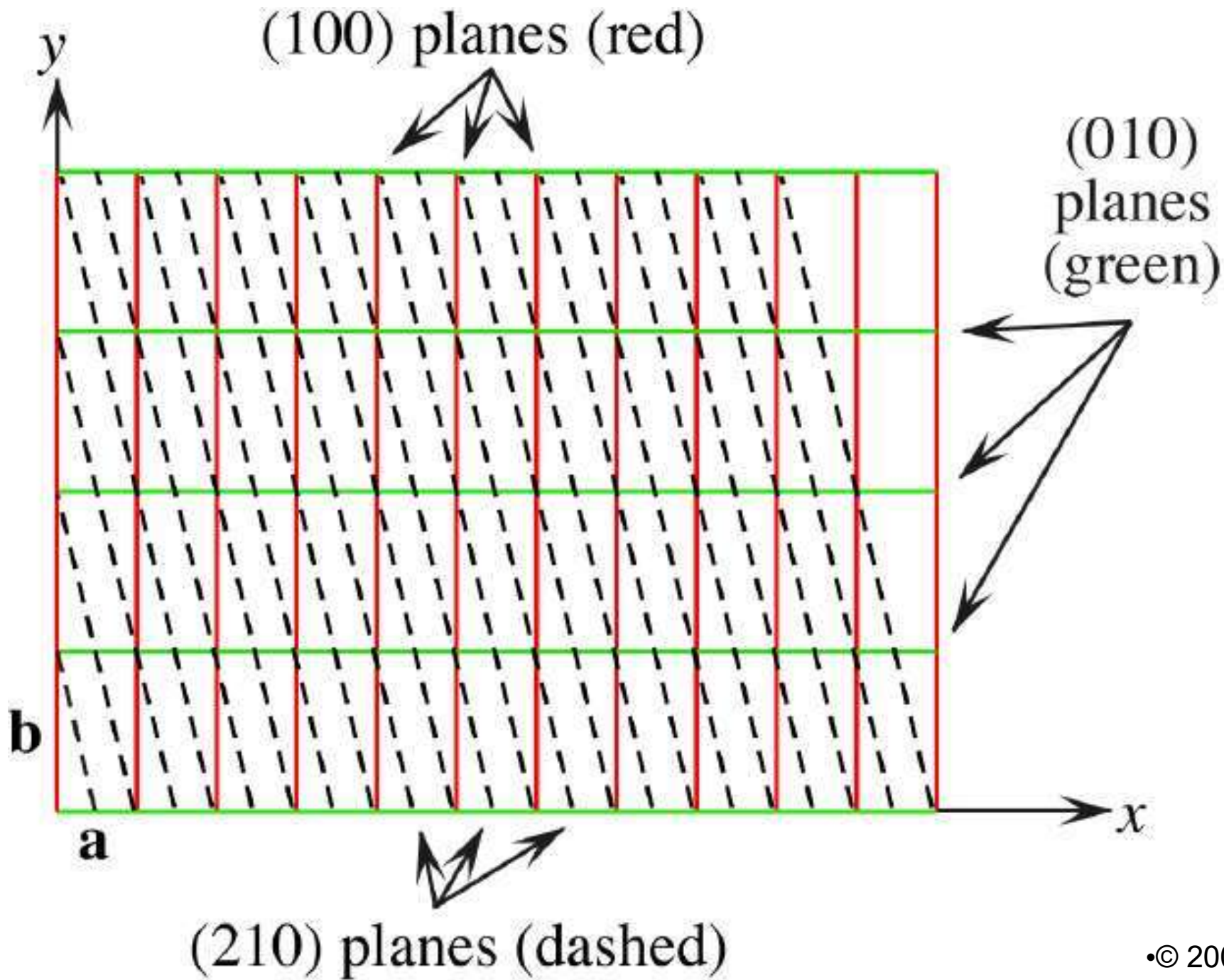


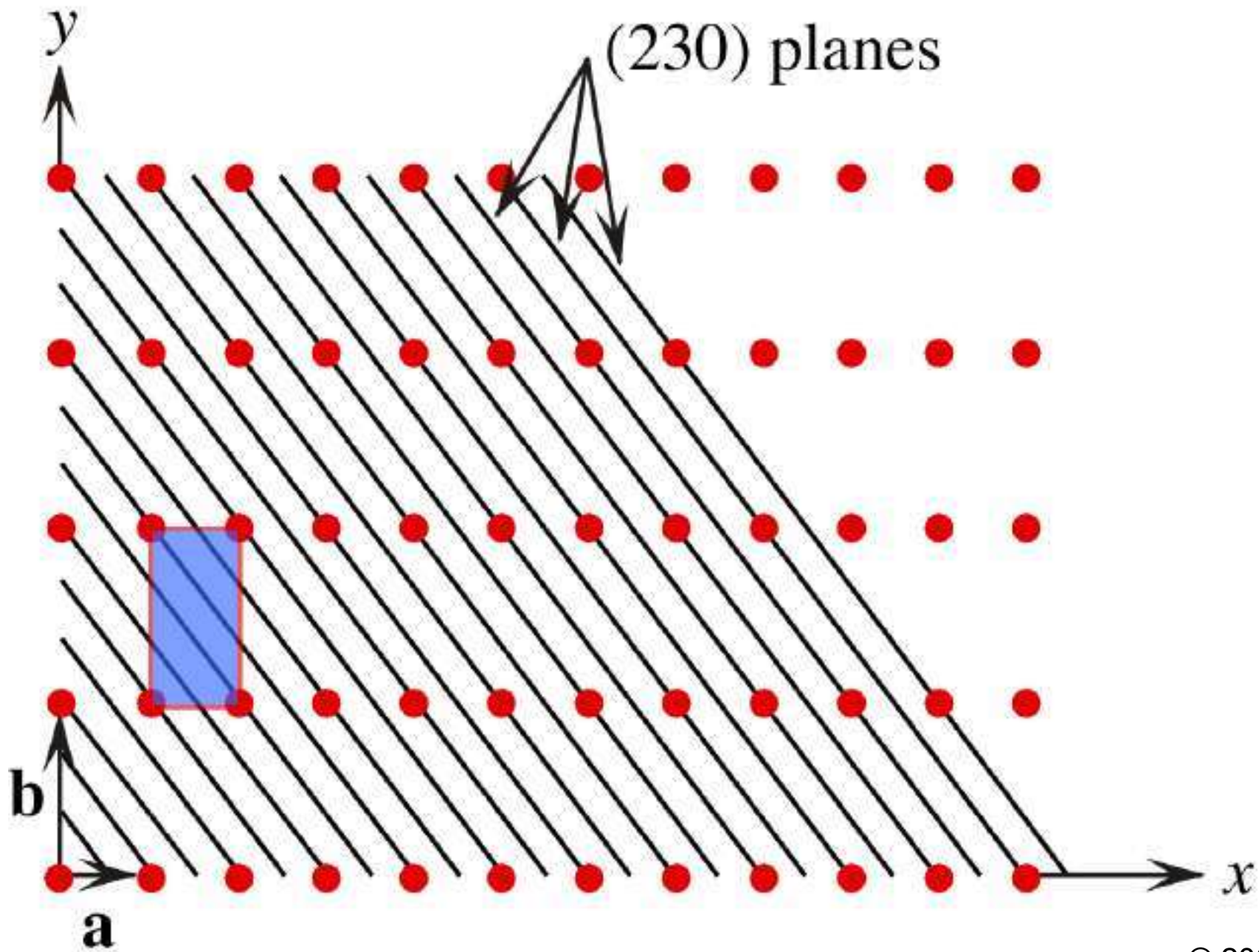
(a)

(200)

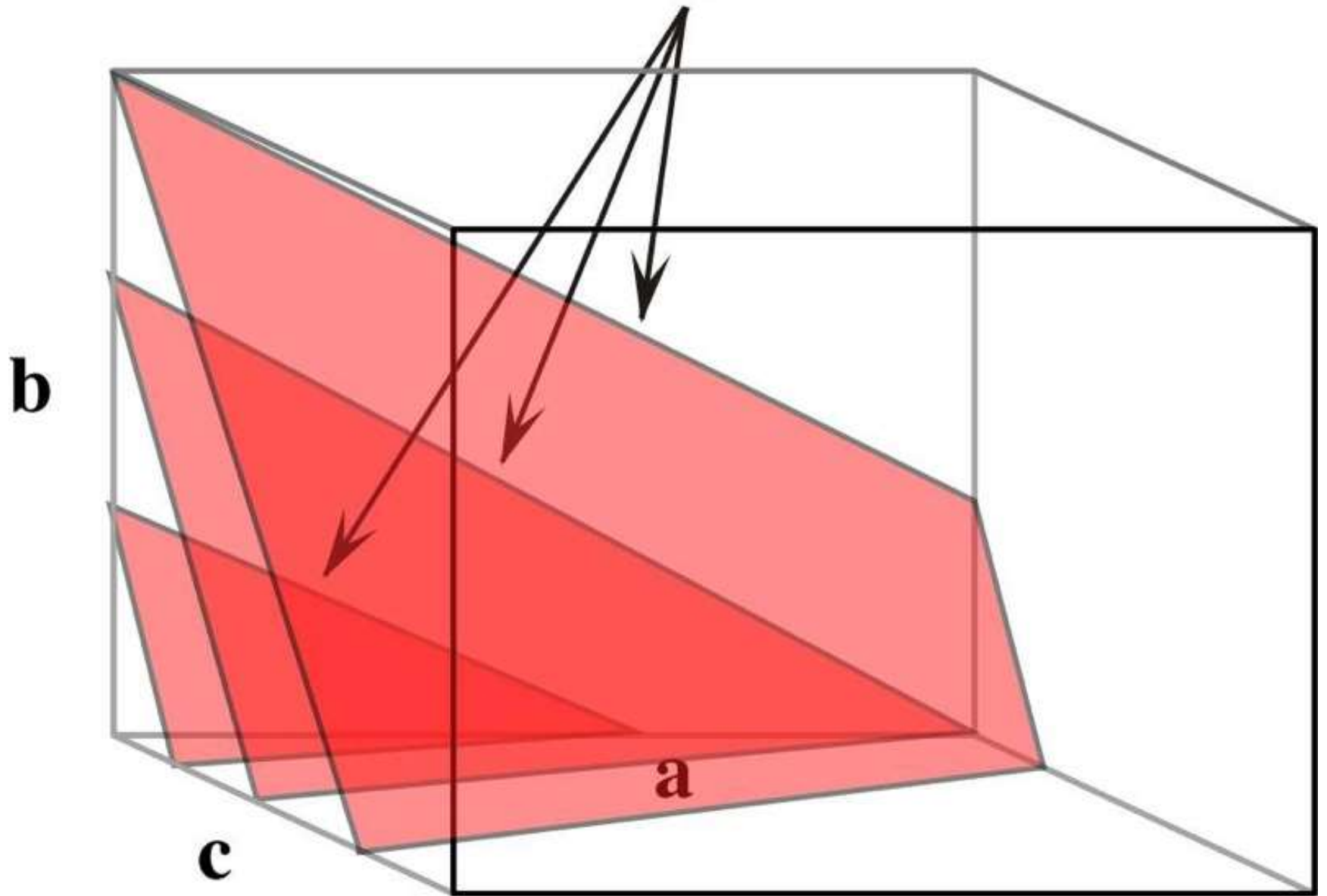


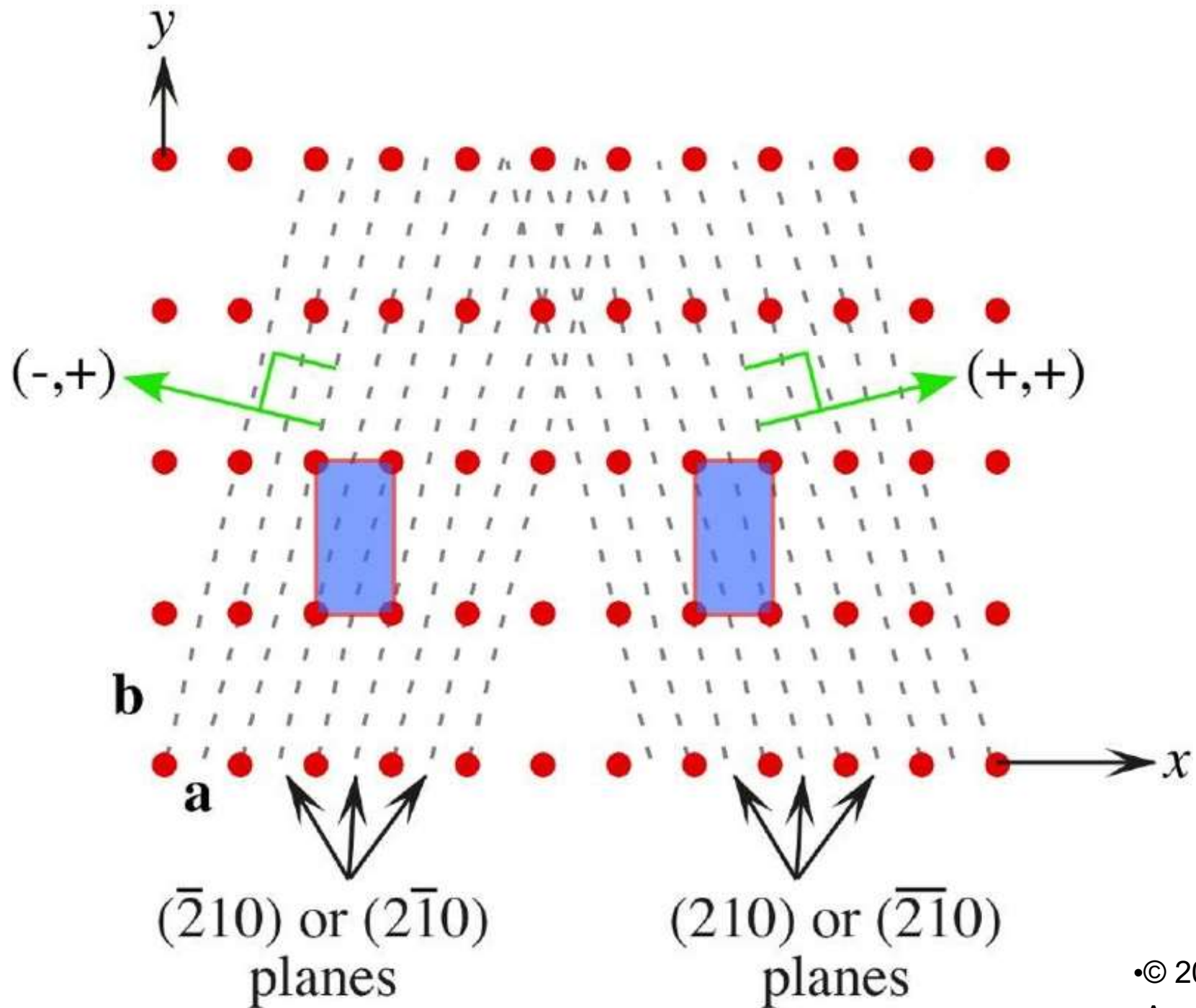
(b)



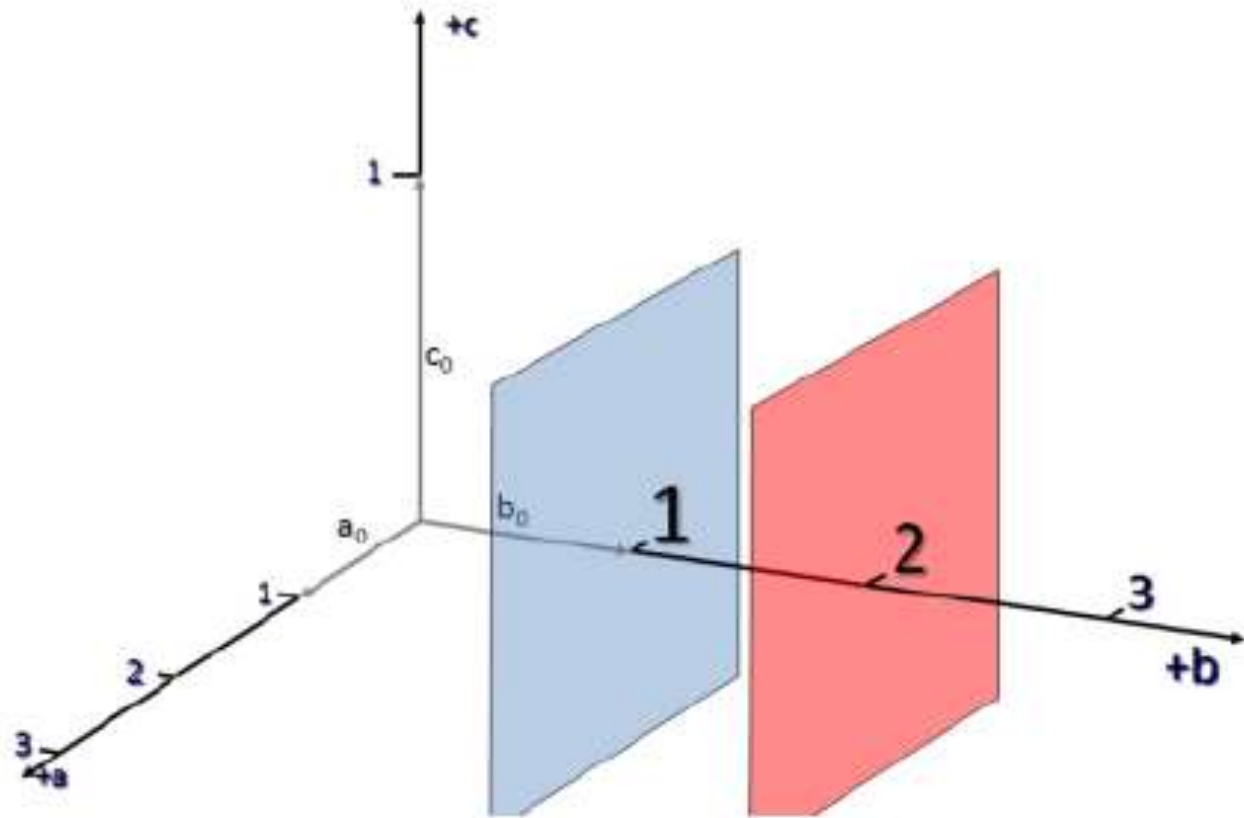


(234) planes

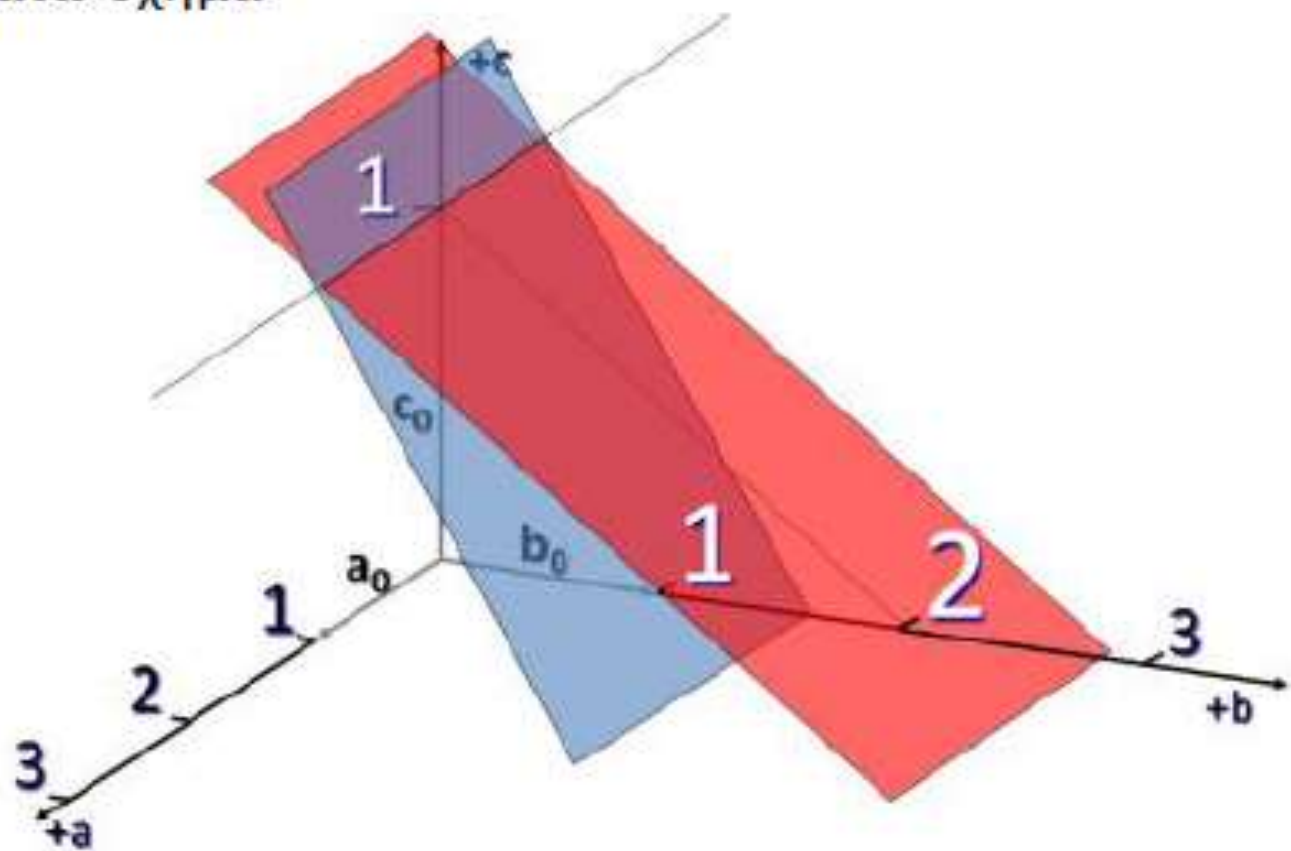




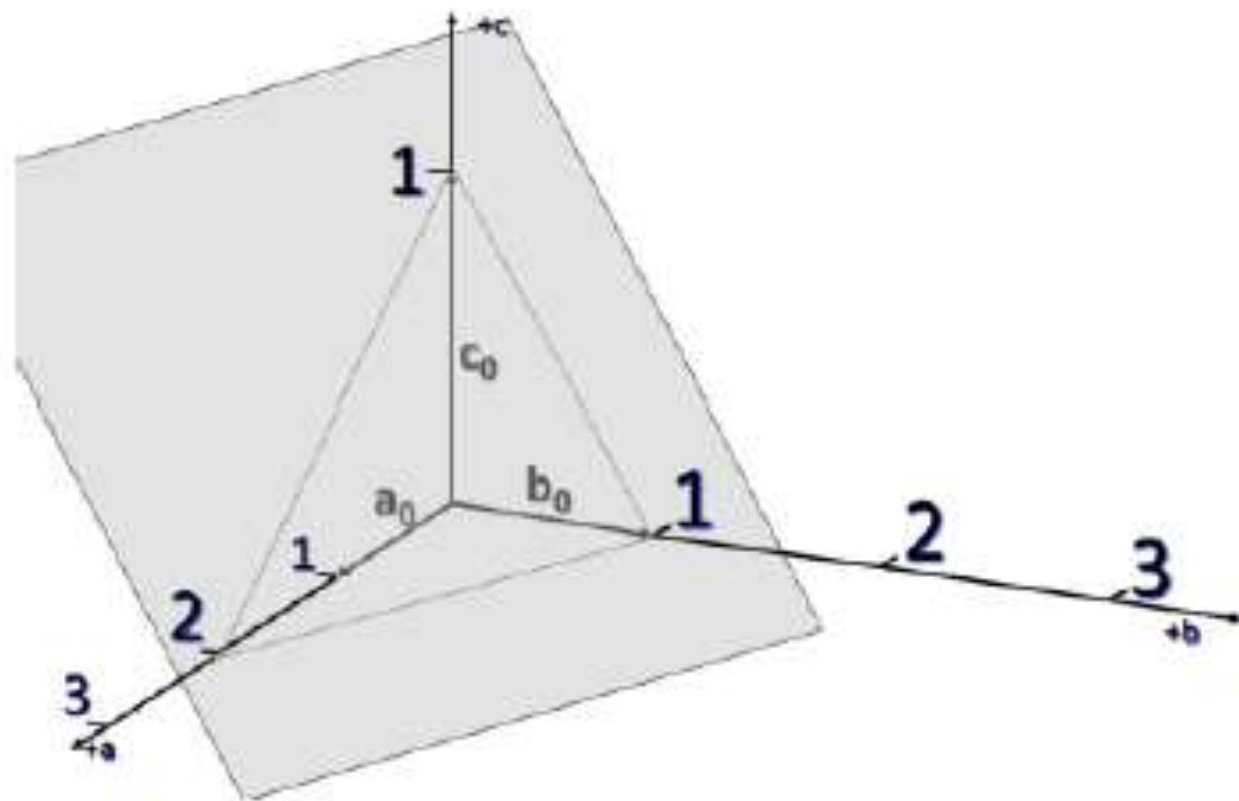
13. Ονομάστε τις δύο έδρες (επίπεδα) που βλέπετε στο παρακάτω σχήμα



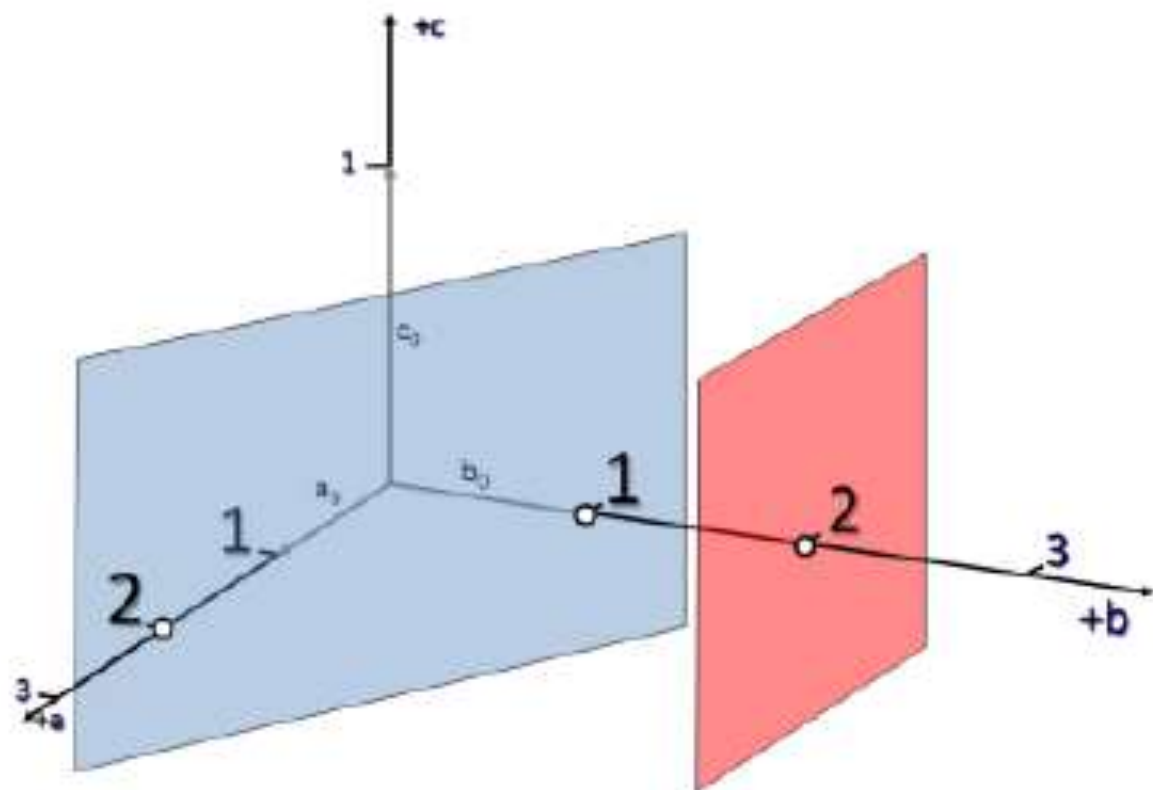
12. Ονομάστε τις δύο έδρες (επίπεδα) που βλέπετε στο παρακάτω σχήμα



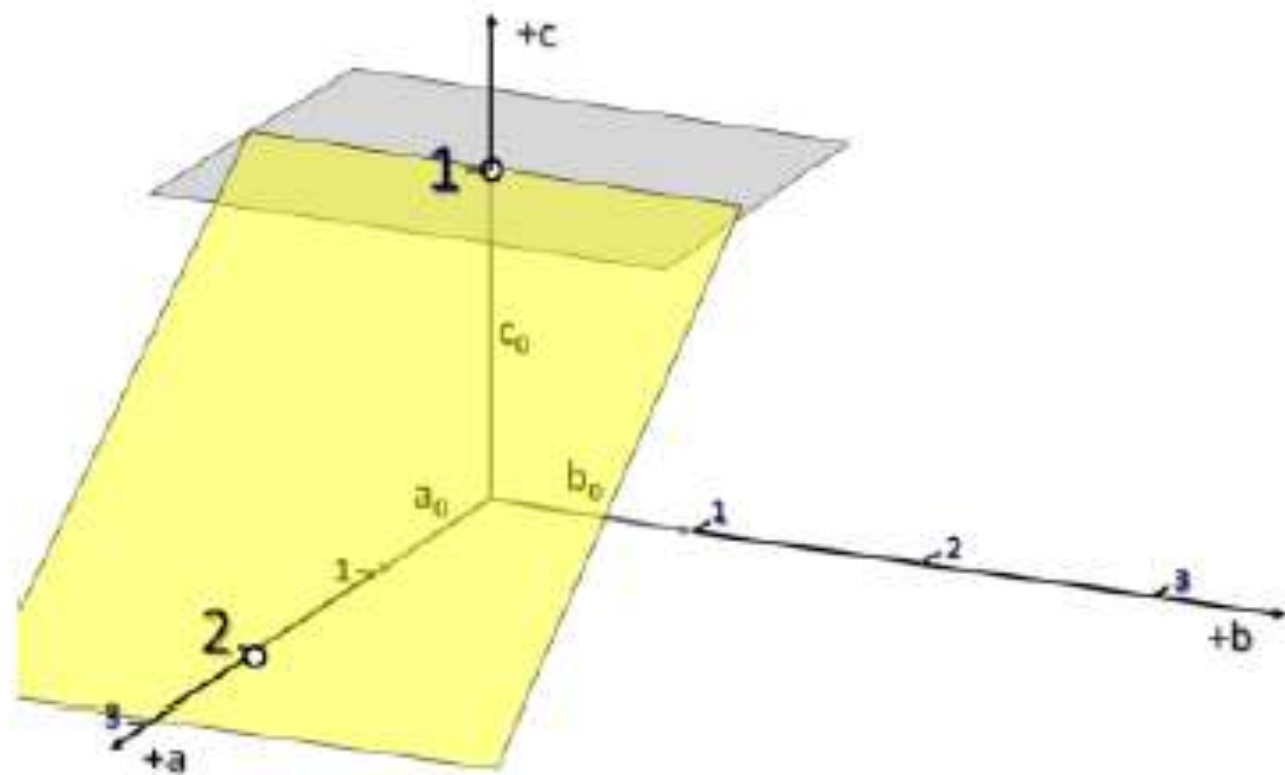
14. Ονομάστε την έδρα (επίπεδο) που βλέπετε στο παρακάτω σχήμα



15. Ονομάστε τις δύο έδρες (επίπεδα) που βλέπετε στο παρακάτω σχήμα



16. Ονομάστε τις δύο έδρες (επίπεδα) που βλέπετε στο παρακάτω σχήμα



17. Ονομάστε την έδρα (επίπεδο) που βλέπετε στο παρακάτω σχήμα

