Lecture 2

Reciprocal lattice and diffraction

ใช้คลื่นที่มี wavelength อยู่ใน order เดียวกับระยะห่างระหว่าง atoms ซึ่ง ~ 10^{-10} m

$\Rightarrow$ x-ray ที่มีพลังงานใน range ของ keV

$\Rightarrow$ neutrons " meV

คลื่น interact กับ atoms อย่างไร.

x-ray : electromagnetic wave

↳ interact กับ e^-

neutrons : interact กับ nucleus โดยตรง

crystal structure : มี periodic pattern.

↳ = Bravais lattice + atoms (basis)

ความเป็น periodic

periodic pattern ของ atoms

↳ Hamiltonian มีความเป็น periodic ด้วย.

คลื่นจะ interact กับ potential ที่เป็น periodic.

$\Rightarrow$ คลื่นที่สะท้อนจะมีข้อมูลความเป็น periodicity ของ crystal structure.

scattere wave

ส่ง plane wave ~ $e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}$ ผลต่างของ $\vec{k}$ กับ $\vec{k}'$

incident wave

$\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}'$

$k' = k - w$

$\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{R}$ lattice translation vector

คือ $\vec{T}$

$$\vec{R} = \vec{T} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$$

$$\Rightarrow \quad e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{R})}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1.} \quad *$$

lattice ที่เกิดจาก $\vec{R}$ ทั้งหมด ← direct space.

reciprocal lattice ที่เกิดจาก $\vec{k}$ ← reciprocal space

หา $\vec{k} = ?$

จาก $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$

หา $\vec{k}$ ที่ $\boxed{\vec{k}\cdot\vec{R} = 2\pi n} \rightarrow e^{i2\pi n} = 1.$

$\vec{k} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3 \; ; m_1, m_2, m_3$ integers.

$\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$ และ $\vec{b}_3$ ต้องเขียนในรูปของ $\vec{a}_1$ $\vec{a}_2$ $\vec{a}_3$ ได้

$$\vec{b}_1 = 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)}$$

1 → 2 → 3 → 1

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \leftarrow$$

ตรวจสอบความสัมพันธ์ระหว่าง $\vec{a}_i$ กับ $\vec{b}_j$

$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j$ โดยที่ $i \neq j$ เท่ากับ 0

$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_i$

พิจารณา

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_1 = 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \cdot \vec{a}_1 = 2\pi$$

$$\vec{b}_2 \cdot \vec{a}_2 = 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \cdot \vec{a}_2$$

$$= 2\pi \cdot \frac{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = 2\pi.$$

$$\vec{K} \cdot \vec{R} = 2\pi n$$

$$(m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3) \cdot (n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3)$$

$$= 2\pi \underbrace{(m_1 n_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3)}_{= n \leftarrow \text{integer}}$$

$$\boxed{\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}}$$

$\Rightarrow$ m_1, m_2, m_3 ต้องเป็น integer ด้วย

... integer ของ.

$\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$, $\vec{b}_3$

$\vec{K} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3$; m_i เป็น inte

นิยามของ Bravais lattice.

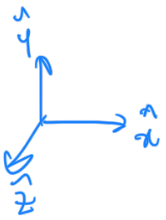
=> reciprocal lattice เป็น Bravais latti

ตัวอย่างของ reciprocal lattice ใน 3D.

พิจารณา cubic system ที่มี 3 Bravais lattices

1. SC. $\vec{a}_1 = a\hat{x}$ $\quad \vec{a}_2 = a\hat{y}$ $\quad \vec{a}_3 = a\hat{z}$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = 2\pi \cdot \frac{a^2 \hat{x}}{a^3}$$



$$\boxed{\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a}\hat{x} \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a}\hat{y} \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{a}\hat{z} \end{aligned}}$$

← simple cubic

2. fcc: $\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$

$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z})$

$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\left[\frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z}) \times \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})\right]}{a^3/4}$$

$$= 2\pi \cdot \frac{\cancel{a}^{2}}{\cancel{4}} \cdot \frac{\cancel{4}}{a\cancel{3}} (\hat{z} + \hat{y} - \hat{x})$$

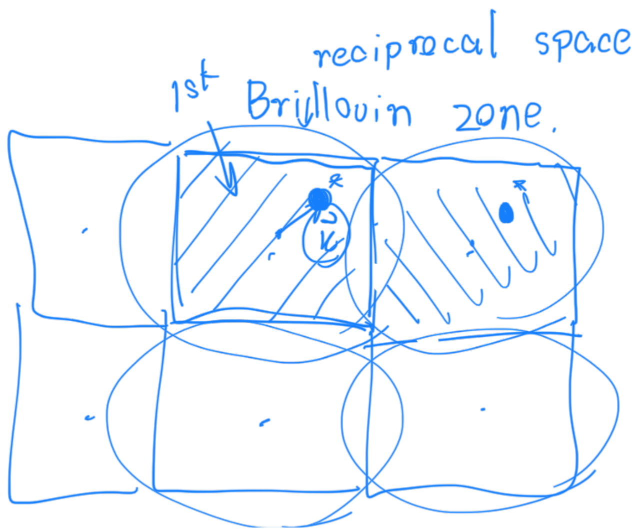
$$\boxed{\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \end{aligned}}$$ ← bcc

3. bcc :

$$\left.\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z}) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{z}) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y}). \end{aligned}\right\} \text{fcc}$$

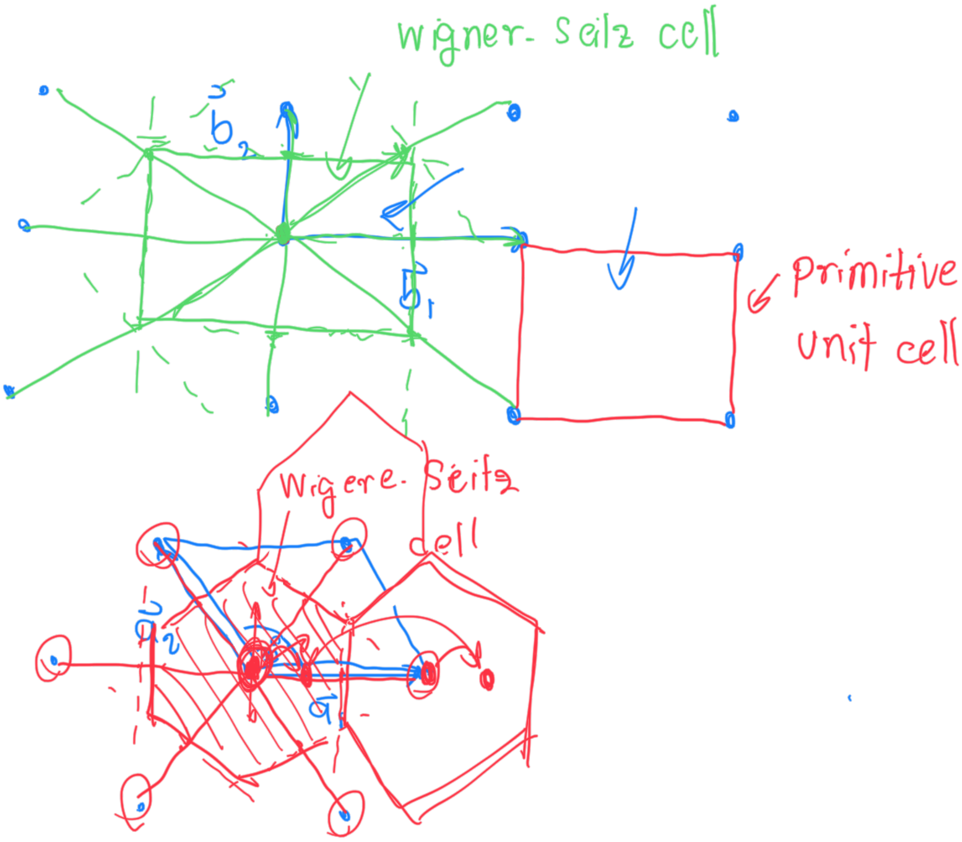
First Brillouin zone.

จากสมบัติ periodicity ของระบบ. ทำให้ขอบเขต ของ reciprocal space ที่มีสมบัติเชิงกายภาพที่ซ้ำกัน.



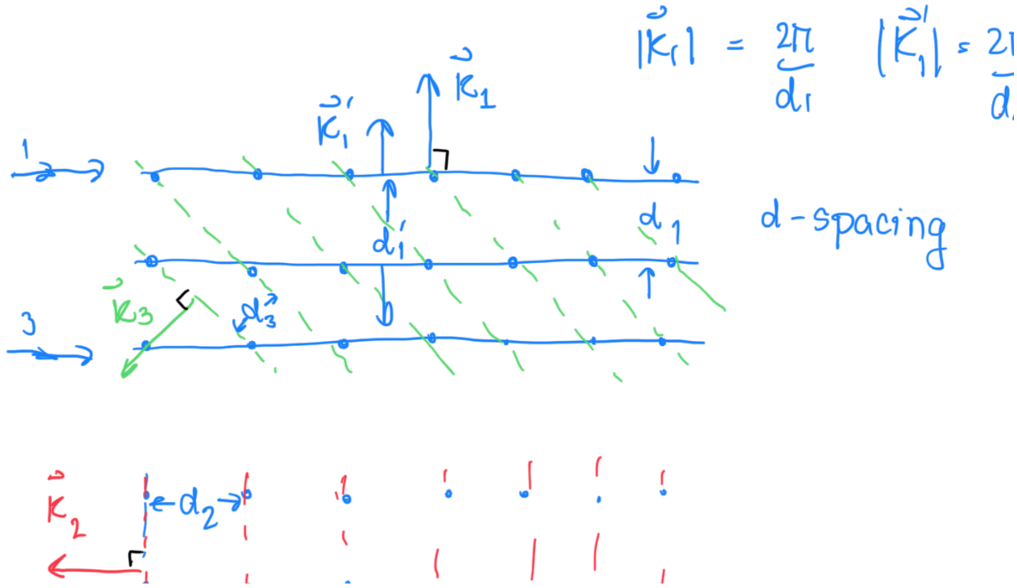
คือ primitive unit cell ที่นิยามโดยใช้

Wigner-Seitz cell



Lattice plane

ระนาบของ lattice point และระนาบนี้จะมีความสัมพันธ์กับ vector , $\vec{k}$, ใน reciprocal space.



Theorem : ความสัมพันธ์ระหว่าง lattice planes กับ reciproca vectors

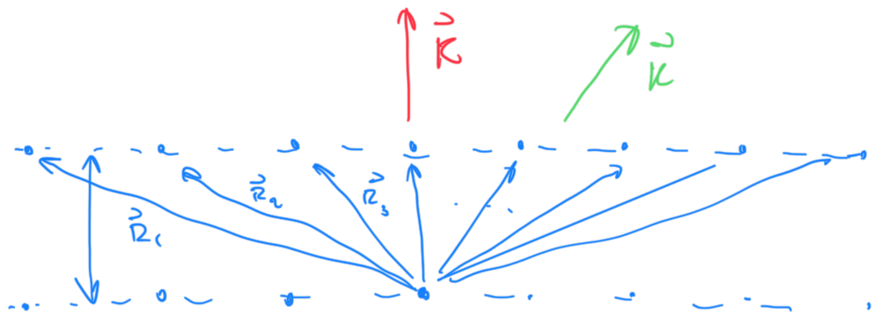
- ถ้ามีเซ็ตของ lattice planes มีระยะห่างระหว่างกันเท่ากับ d. จะสามารถหา reciprocal vector $\vec{K}$ ที่ตั้งฉากกับ lattice planes เซ็ตนี้ได้ โดยที่ความยาวที่สั้นที่สุดของ $\vec{K}$ จะมีค่า

$$|\vec{K}| = \frac{2\pi}{d}.$$

- ถ้ามี reciprocal $\vec{K}$ เราสามารถหา lattice planes ใน direct space ที่ $\vec{K}$ ตั้งฉากกับระนาบของ planes และเซ็ตของ lattice planes จะมีระยะห่าง เท่ากับ

$$d = \frac{2\pi}{|\vec{K}|}.$$

การพิสูจน์ มาจาก $e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} = 1.$



ให้ $\vec{R}$ ชี้ไปยัง lattice points ที่อยู่ใน plane เดียวกัน.

สามารถหา $\vec{K}$ ที่ $\vec{K}\cdot\vec{R} = 2\pi n$; n คงที่

Miller indices ของ lattice planes.

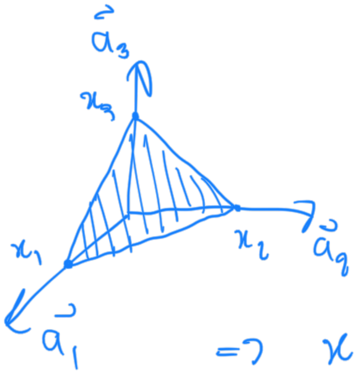
ให้ $\vec{K} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$

จะมี set ของ $\vec{R}$ ที่ form lattice plane

$\vec{K}\cdot\vec{R} = A$ โดยที่ A เป็นค่าคงที่

เลือก 3 จุดจาก lattice planes อันนี้

x_1 , x_2 , x_3 ที่อยู่บน $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, และ $\vec{a}_3$ ตามลำดับ.



$$\Rightarrow \vec{K}\cdot x_i\vec{a}_i = A$$

$$\Rightarrow x_1 = \frac{A}{2\pi h}, \quad x_2 = \frac{A}{2\pi k} \quad x_3 = \frac{A}{2\pi l}$$

$$x_1 : x_2 : x_3 = \frac{1}{h} : \frac{1}{k} : \frac{1}{l}$$

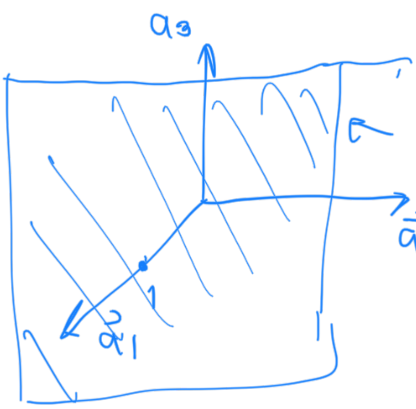
Miller index

ตัวอย่าง $\vec{K} = (1,0,0)$ $h=1$, $k=0$, $l=0$

$$\vec{K} = 1\vec{b}_1 + 0\vec{b}_2 + 0\vec{b}_3$$

$$x_1 : x_2 : x_3 = \frac{1}{1} : \frac{1}{0} : \frac{1}{0}$$

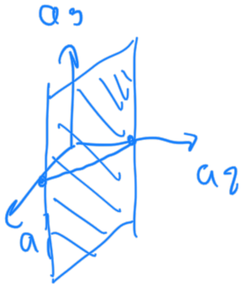
$$= 1 : \infty : \infty .$$



ขนานกับ $\vec{a}_2$ และ $\vec{a}_3$ แต่ตัด $\vec{a}_1$ ที่ 1.

$\vec{K} = (1,1,0)$

$$x_1 : x_2 : x_3 = 1 : 1 : \infty$$



Diffraction ของคลื่นจาก crystal structure

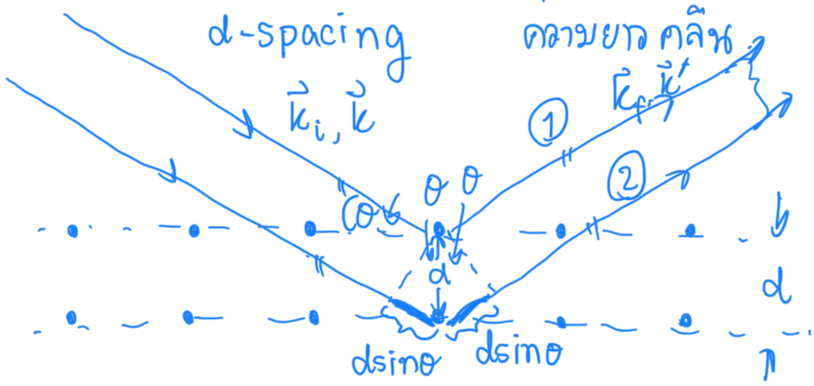
Diffraction law มี 2 แบบ.

1. Bragg's law:

มุมระหว่างคลื่นที่ตกกระทบ กับระนาบ

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

d-spacing　　ความยาวคลื่น



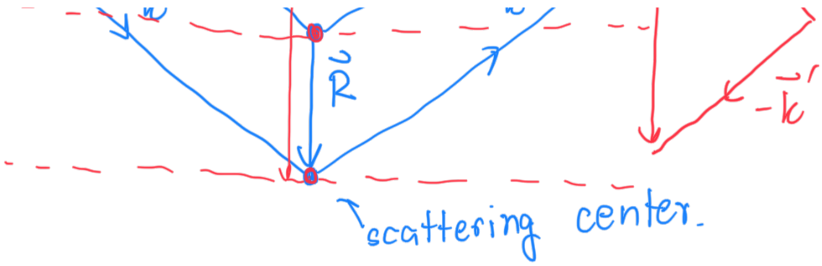
constructive interference.

path difference = $n\lambda$; n: integer

$$\boxed{2d\sin\theta = n\lambda}$$

$$\boxed{2d\sin\theta = \lambda}$$

2. von Laue's law.



$$\boxed{\vec{R}\cdot(\vec{k}-\vec{k}') = 2\pi m}$$; m integer.

$$e^{i\vec{R}\cdot(\vec{k}-\vec{k}')} = 1.$$

$$e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} = 1$$ diffraction

$$\Rightarrow \boxed{\vec{K} = \vec{k}-\vec{k}'}$$

crystal structure.

$$\vec{k}' = \vec{k} - \vec{K}$$

$$\cancel{|\vec{k}'|^2} = |\vec{k}-\vec{K}|^2$$

$$= \cancel{|\vec{k}|^2} - 2\vec{k}\cdot\vec{K} + |\vec{K}|^2$$

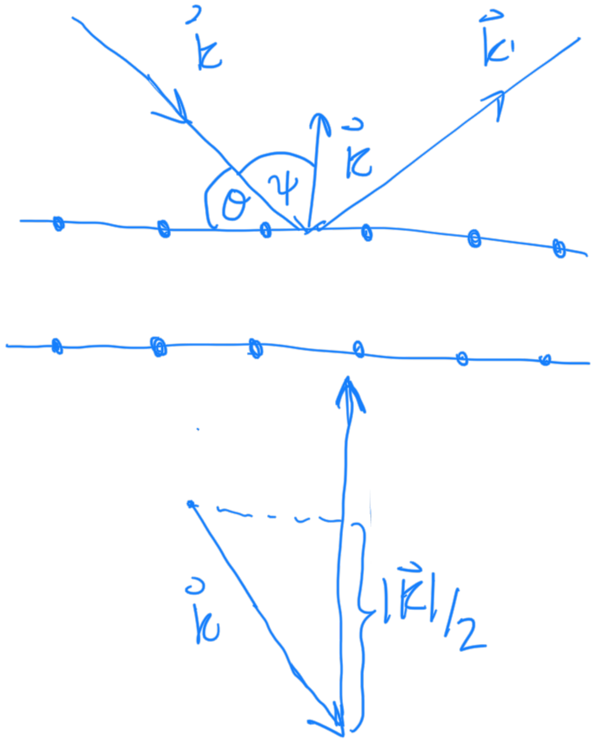
ขนาดของ $\vec{k}$ กับ $\vec{k}'$ เท่ากัน

$$\Rightarrow \boxed{\vec{k}\cdot\vec{K} = \frac{|\vec{K}|^2}{2}}$$

$$\vec{k}\cdot\cancel{|\vec{K}|}\cdot\hat{K} = \frac{|\vec{K}|^{\cancel{2}}}{2}$$

$$\boxed{\vec{k}\cdot\hat{K} = \frac{|\vec{K}|}{2}}$$

ความยาวของ $\vec{k}$ ในทิศ $\hat{K}$ เท่ากับขนาดของ $|\vec{K}|/2$



$\cos\psi = \sin\theta$

เพราะ

$\psi + \theta = 90^\circ$

พิจารณา

$$\vec{k}\cdot\hat{K} = |\vec{k}|\cos\psi = |\vec{k}|\sin\theta$$

$$|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\Rightarrow \quad \vec{k}\cdot\hat{K} = \frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta$$

แต่ $\quad \vec{k}\cdot\hat{K} = \frac{|\vec{K}|}{2} = \frac{2\pi n}{d}\cdot\frac{1}{2} = \frac{\pi n}{d}$

$$\Rightarrow \quad \frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta = \frac{\pi n}{d}$$

$$\boxed{2d\sin\theta = n\lambda}$$

Diffraction จาก monatomic crystal

แต่ละ atom จะ contribute phase ที่ขึ้นกับตำแหน่งของ atom ใน unit cell

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{d}_i}$$; $\vec{d}_i$ เป็น vector ที่บอกตำแหน่งของ atom ใน unit cell.

ไม่ใช่ d-spacing

structure factor.

scattering cross-section

$$\boxed{S_k = \sum_{j=1}^{n} f_j e^{i\vec{k}\cdot\vec{d}_j}}$$

$$I = |S_k|^2$$

ตัวอย่าง

1. bcc ใน cubic unit cell.

$$\vec{d}_1 = 0.$$

$$\vec{d}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$$

$$S_k = f\left(1 + e^{i\vec{k}\cdot\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})}\right)$$

ถ้าใช้ $\vec{k} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z})$

$$\Rightarrow S_k = f\left(1 + e^{i\pi(h+k+l)}\right)$$

$$= f\left(1 + (-1)^{n+k+l}\right)$$

$$\Rightarrow \quad S_k = \begin{cases} 2f & \text{ถ้า } h+k+l \text{ เป็นเลขคู่} \\ 0 & \text{ถ้า } " \text{ คี่} \end{cases}$$

2. fcc :

$$d_1 = 0 \quad d_2 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}) \quad d_3 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z})$$

$$d_4 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z})$$

$$S_k = f\left(1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{h+l} + (-1)^{k+l}\right)$$

ถ้า h, k, l เป็นเลขคี่ หรือคู่ ทั้งหมด

$$S_k = 4f.$$

h, k, l เป็นเลขคู่หรือคี่ ตัวเดียว

$$S_k = 0$$

3. Diamond structure.

พิจารณาเป็น fcc structure ที่มี atom ที่

$$\vec{d}_1 = 0 \qquad \vec{d}_2 = \frac{a}{4}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}),$$

$$S_k = f\left(1 + e^{i\pi/2\,(h+k+l)}\right)$$

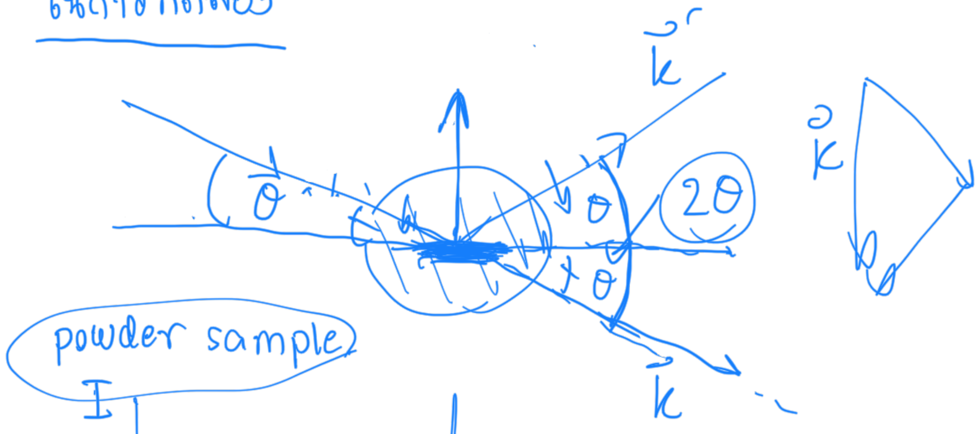
$= 2f$ ถ้า $h+k+l = 4n$

$$\Rightarrow \quad S_k = \begin{cases} 2f & \text{ถ้า } h+k+l = 4n \\ (1\pm i)f & \text{ถ้า } h+k+l \text{ เป็นเลขคี่} \\ 0 & \text{ถ้า } h+k+l = 2(2n+1) \end{cases}$$

เลขคี่

$$I = \begin{cases} 4f^2 \\ 2f^2 \\ 0 \end{cases}$$

ในการทดลอง



d-spacing ของ
หลาย ๆ plane

ตำแหน่ง → space group , unit cell

intensity → ตำแหน่งของ atom ใน unit c

→ ของ crystal structure ได้.