

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Владимирский государственный университет имени Александра  
Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»

Кафедра физики и прикладной математики

С.В. Кутровская, А.Ю. Лексин, О.А. Новикова, А.Ю. Шагурина

Научные основы наносистемного анализа

**Методические указания к лабораторным занятиям  
по программе дополнительного профессионального образования  
«Технологии микро- и наносистемной техники»  
(модуль 2)**

Владимир-2018 г.

УДК 681.3

ББК 22.3с

Составители: С.В. Кутровская, А.Ю. Лексин, О.А Новикова, А.Ю. Шагурина.

Рецензент доктор физико-математических наук, профессор Владимирского государственного университета имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых – Л.В. Фуров.

Печатается по решению редакционного совета ВлГУ

Методические указания к лабораторным занятиям по программе дополнительного профессионального образования «Технологии микро- и наносистемной техники» (модуль 2) / Владим. гос. уни-т имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых; С.В. Кутровская, А.Ю. Лексин, О.А Новикова, А.Ю. Шагурина – Владимир: Изд-во ВлГУ, 2018. – 31 с.

Рассмотрено компьютерное моделирование разбиений периодического пространства, принцип работы на электронных и растровых микроскопах, а так же спектральный анализ и методы в нанотехнологии.

Предназначены для самостоятельной работы студентов.

Рекомендовано для формирования профессиональных компетенций в соответствии с ФГОС 3-го поколения.

Ил. 17. Табл. 1. Библиогр.: 9 назв.

УДК 681.3

ББК 22.3с

## СОДЕРЖАНИЕ

Лабораторная работа №1. Компьютерное моделирование разбиений периодического пространства. Координационные последовательности разбиений .....	4
Лабораторная работа №2. Принцип неопределенности. Соотношение неопределенности для фотонов. ....	20
Лабораторная работа №3. Спектральный анализ. Спектральные методы в нанотехнологии, (Волновой рентгенофлуоресцентный спектрометр последовательного анализа «ARL ADVANT'X») .....	23
Библиографический список .....	31

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №1

Компьютерное моделирование разбиений периодического пространства. Координационные последовательности разбиений.

Часть 1. Конденсированное состояние вещества. Модель послойного роста 2-D молекулярных кластеров-полимино (программа POL-PACK).

*Цель работы.* Изучение возможностей моделирования двумерных периодических структур на основе разбиения упаковочных пространств на полимино. Исследование закономерностей окантовочного роста двумерных структур.

*Теория разбиения.*

### Упаковочное пространство

Упаковочное пространство (УП) – решётка, каждому узлу которой (элементарной ячейке) приписан вес (индекс, цвет), таким образом, что множество точек с одинаковыми весами образует одну и ту же с точностью до сдвига (трансляции) подрешётку исходной решётки.

Фактически упаковочное пространство задаёт в решётке подрешётку, которая для будущей упаковки полимино будет решёткой трансляции.

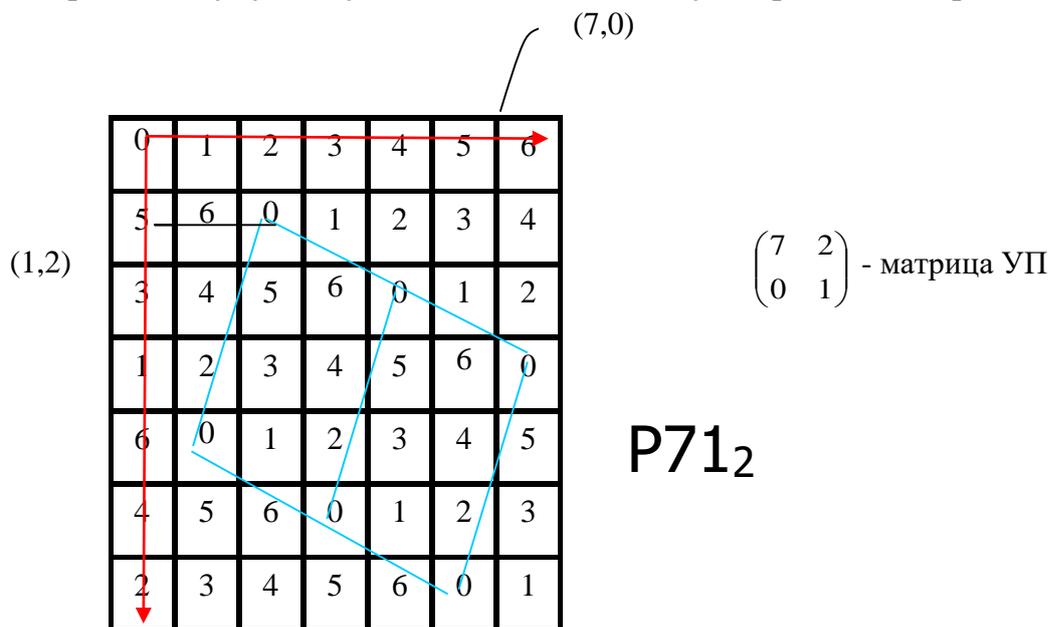


Рис. 1 Упаковочное пространство

Определитель матрицы УП  $N = 7$  совпадает с площадью элементарной ячейки подрешётки, которую задаёт УП и называется порядком упаковочного пространства. Выясним, какие бывают упаковочные пространства 7-го порядка:

Таблица 1

Упаковочные пространства 7-го порядка

$P7I_0$	$P7I_1$	$P7I_2$																																																																																																																																																																								
<table border="1" style="width: 100%; text-align: center;"> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> </table>	0	1	2	3	4	5	6	0	0	1	2	3	4	5	6	0	0	1	2	3	4	5	6	0	0	1	2	3	4	5	6	0	0	1	2	3	4	5	6	0	0	1	2	3	4	5	6	0	0	1	2	3	4	5	6	0	<table border="1" style="width: 100%; text-align: center;"> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> <tr><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td></tr> <tr><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td></tr> <tr><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr> <tr><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td></tr> <tr><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td></tr> <tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td></tr> </table>	0	1	2	3	4	5	6	0	6	0	1	2	3	4	5	6	5	6	0	1	2	3	4	5	4	5	6	0	1	2	3	4	3	4	5	6	0	1	2	3	2	3	4	5	6	0	1	2	1	2	3	4	5	6	0	1	<table border="1" style="width: 100%; text-align: center;"> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> <tr><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td></tr> <tr><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td></tr> <tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td></tr> <tr><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td></tr> <tr><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr> <tr><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td></tr> </table>	0	1	2	3	4	5	6	0	5	6	0	1	2	3	4	5	3	4	5	6	0	1	2	3	1	2	3	4	5	6	0	1	6	0	1	2	3	4	5	6	4	5	6	0	1	2	3	4	2	3	4	5	6	0	1	2
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
6	0	1	2	3	4	5	6																																																																																																																																																																			
5	6	0	1	2	3	4	5																																																																																																																																																																			
4	5	6	0	1	2	3	4																																																																																																																																																																			
3	4	5	6	0	1	2	3																																																																																																																																																																			
2	3	4	5	6	0	1	2																																																																																																																																																																			
1	2	3	4	5	6	0	1																																																																																																																																																																			
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
5	6	0	1	2	3	4	5																																																																																																																																																																			
3	4	5	6	0	1	2	3																																																																																																																																																																			
1	2	3	4	5	6	0	1																																																																																																																																																																			
6	0	1	2	3	4	5	6																																																																																																																																																																			
4	5	6	0	1	2	3	4																																																																																																																																																																			
2	3	4	5	6	0	1	2																																																																																																																																																																			
$P7I_5$	$P7I_3$	$P7I_4$																																																																																																																																																																								
<table border="1" style="width: 100%; text-align: center;"> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> <tr><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr> <tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td></tr> <tr><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td></tr> <tr><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td></tr> <tr><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td></tr> <tr><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td></tr> </table>	0	1	2	3	4	5	6	0	4	5	6	0	1	2	3	4	1	2	3	4	5	6	0	1	5	6	0	1	2	3	4	5	2	3	4	5	6	0	1	2	6	0	1	2	3	4	5	6	3	4	5	6	0	1	2	3	<table border="1" style="width: 100%; text-align: center;"> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> <tr><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td></tr> <tr><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td></tr> <tr><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td></tr> <tr><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td></tr> <tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td></tr> <tr><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr> </table>	0	1	2	3	4	5	6	0	3	4	5	6	0	1	2	3	6	0	1	2	3	4	5	6	2	3	4	5	6	0	1	2	5	6	0	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	6	0	1	4	5	6	0	1	2	3	4	<table border="1" style="width: 100%; text-align: center;"> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> <tr><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td></tr> <tr><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr> <tr><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td></tr> <tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td></tr> <tr><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td></tr> <tr><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td></tr> </table>	0	1	2	3	4	5	6	0	2	3	4	5	6	0	1	2	4	5	6	0	1	2	3	4	6	0	1	2	3	4	5	6	1	2	3	4	5	6	0	1	3	4	5	6	0	1	2	3	5	6	0	1	2	3	4	5
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
4	5	6	0	1	2	3	4																																																																																																																																																																			
1	2	3	4	5	6	0	1																																																																																																																																																																			
5	6	0	1	2	3	4	5																																																																																																																																																																			
2	3	4	5	6	0	1	2																																																																																																																																																																			
6	0	1	2	3	4	5	6																																																																																																																																																																			
3	4	5	6	0	1	2	3																																																																																																																																																																			
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
3	4	5	6	0	1	2	3																																																																																																																																																																			
6	0	1	2	3	4	5	6																																																																																																																																																																			
2	3	4	5	6	0	1	2																																																																																																																																																																			
5	6	0	1	2	3	4	5																																																																																																																																																																			
1	2	3	4	5	6	0	1																																																																																																																																																																			
4	5	6	0	1	2	3	4																																																																																																																																																																			
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
2	3	4	5	6	0	1	2																																																																																																																																																																			
4	5	6	0	1	2	3	4																																																																																																																																																																			
6	0	1	2	3	4	5	6																																																																																																																																																																			
1	2	3	4	5	6	0	1																																																																																																																																																																			
3	4	5	6	0	1	2	3																																																																																																																																																																			
5	6	0	1	2	3	4	5																																																																																																																																																																			
	$P7I_6$	$P7I_0$																																																																																																																																																																								
<table border="1" style="width: 100%; text-align: center;"> <tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td></tr> <tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td></tr> <tr><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td></tr> <tr><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td></tr> <tr><td>4</td><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr> <tr><td>5</td><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td></tr> <tr><td>6</td><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td><td>5</td><td>6</td></tr> </table>	0	1	2	3	4	5	6	0	1	2	3	4	5	6	0	1	2	3	4	5	6	0	1	2	3	4	5	6	0	1	2	3	4	5	6	0	1	2	3	4	5	6	0	1	2	3	4	5	6	0	1	2	3	4	5	6	<table border="1" style="width: 100%; text-align: center;"> <tr><td>0</td><td>0</td><td>0</td><td>0</td><td>0</td><td>0</td><td>0</td><td>0</td></tr> <tr><td>1</td><td>1</td><td>1</td><td>1</td><td>1</td><td>1</td><td>1</td><td>1</td></tr> <tr><td>2</td><td>2</td><td>2</td><td>2</td><td>2</td><td>2</td><td>2</td><td>2</td></tr> <tr><td>3</td><td>3</td><td>3</td><td>3</td><td>3</td><td>3</td><td>3</td><td>3</td></tr> <tr><td>4</td><td>4</td><td>4</td><td>4</td><td>4</td><td>4</td><td>4</td><td>4</td></tr> <tr><td>5</td><td>5</td><td>5</td><td>5</td><td>5</td><td>5</td><td>5</td><td>5</td></tr> <tr><td>6</td><td>6</td><td>6</td><td>6</td><td>6</td><td>6</td><td>6</td><td>6</td></tr> </table>	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	3	3	3	3	3	3	3	3	4	4	4	4	4	4	4	4	5	5	5	5	5	5	5	5	6	6	6	6	6	6	6	6																																																									
0	1	2	3	4	5	6	0																																																																																																																																																																			
1	2	3	4	5	6	0	1																																																																																																																																																																			
2	3	4	5	6	0	1	2																																																																																																																																																																			
3	4	5	6	0	1	2	3																																																																																																																																																																			
4	5	6	0	1	2	3	4																																																																																																																																																																			
5	6	0	1	2	3	4	5																																																																																																																																																																			
6	0	1	2	3	4	5	6																																																																																																																																																																			
0	0	0	0	0	0	0	0																																																																																																																																																																			
1	1	1	1	1	1	1	1																																																																																																																																																																			
2	2	2	2	2	2	2	2																																																																																																																																																																			
3	3	3	3	3	3	3	3																																																																																																																																																																			
4	4	4	4	4	4	4	4																																																																																																																																																																			
5	5	5	5	5	5	5	5																																																																																																																																																																			
6	6	6	6	6	6	6	6																																																																																																																																																																			

Упаковочных пространств 7-го порядка ровно 8.

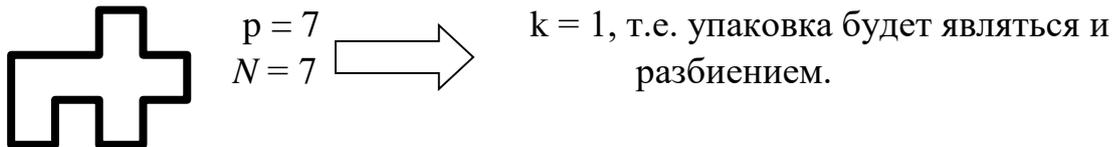
Оказывается, число плоских упаковочных пространств порядка  $N$  равно сумме делителей числа  $N$ .

*Критерий упаковки (полимино, поликуба).*

Поставим задачу: существует ли для заданного полимино трансляционная упаковка с заданным коэффициентом упаковки. Наложим дополнительные условия: пусть полимино в любом месте одинаково

ориентировано и его можно получить из одного независимого полимино с помощью параллельных переносов из решётки трансляций.

Критерий упаковки: для того, чтобы существовала трансляционная упаковка полимино из  $p$  клеток с коэффициентом упаковки  $k = \frac{p}{N}$  необходимо и достаточно, чтобы в одном из упаковочных пространств  $n$ -го порядка в произвольно расположенном полимино, веса всех клеток были попарно различны.



Каждое упаковочное пространство, в котором критерий выполняется, определяет вариант искомой упаковки.

#### Кодировка упаковок полимино в плоскости

Трансляционная упаковка традиционно описывается параметрами решётки трансляций и координатами атомов в долях элементарной ячейки. МДМ позволяет предложить другой способ упаковок с использованием упаковочных пространств. Для каждой из  $N$  ячеек фундаментальной области упаковочного пространства определяется код – цифра от 0 до 3 по следующему правилу: если есть граница полимино сверху и слева, то цифра 3, если только сверху, то цифра 2, если только слева, то цифра 1, если не сверху, не слева, то 0. Правая и нижняя сторона не анализируются.

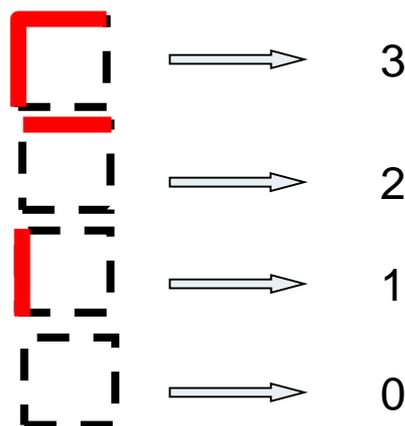


Рис.2 Кодировка упаковок полимино в плоскости

Полученные  $N$  цифр вместе с упаковочным пространством определяют всю упаковку. Для того, чтобы определить код упаковки нужно:

- 1) выяснить какое упаковочное пространство задаёт упаковку;

- 2) восстановить веса упаковочного пространства;
- 3) найти коды N клеток фундаментальной области.

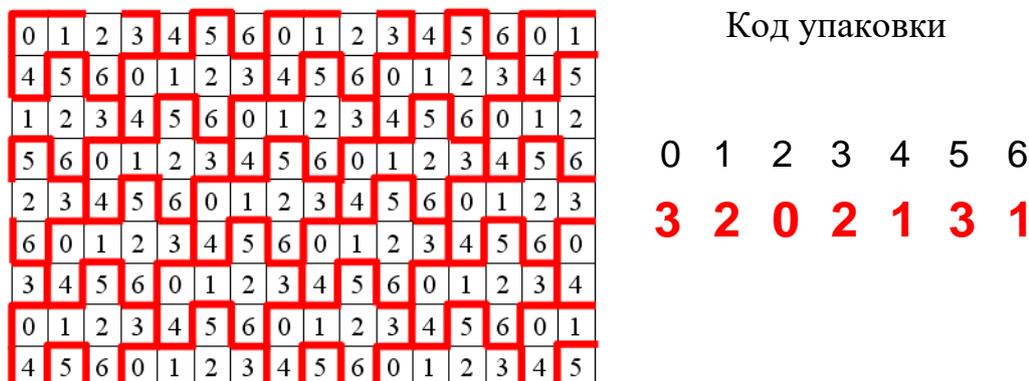


Рис. 3. Упаковочное пространство  $P7I_3$

*Модель послойного роста разбиений упаковок или графов.*

Процесс кристаллообразования является одной из фундаментальных задач кристаллографии. Кристаллы образуются, как правило, либо из расплава, либо из раствора, либо из газовой фазы. Модель послойного роста основана, во-первых, на то, что в результате должна образоваться определённая кристаллическая структура, во-вторых, на предположении, что молекулы к зародышу присоединяются послойно, т.е. со всех сторон. Модель чисто геометрическая, в ней не учитывается модель взаимодействия частиц.

В готовом разбиении или упаковке пространства или плоскости на некоторые замкнутые области, например поликубы, выделяется затравка – одна или несколько замкнутых областей. После этого к выбранной затравке добавляются все фигуры, соседние с затравкой, например, многоугольники, имеющие с затравкой общую границу (участок границы). Повторяя этот процесс многократно, получается фигура, которая с ограниченным радиусом совпадает с многогранником – многогранником послойного роста. В двумерном случае с многоугольником послойного роста.

Модель послойного роста в периодических разбиения позволила сначала экспериментально, а затем и строго математически доказать, что в периодических упаковках разбиения всегда формируется многогранник роста, геометрия которого не зависит от выбора затравки, а зависит только от графа соседства фигур разбиения упаковки и решётки трансляции.

*Экспериментальная часть.*

Открыть программу «ПОЛ.РОСТ+» и подпрограмму РОЛ\_РАСК, в которой после анализа стандартных разбиений перейти к построению нового разбиения (NEV) (рис. 4).

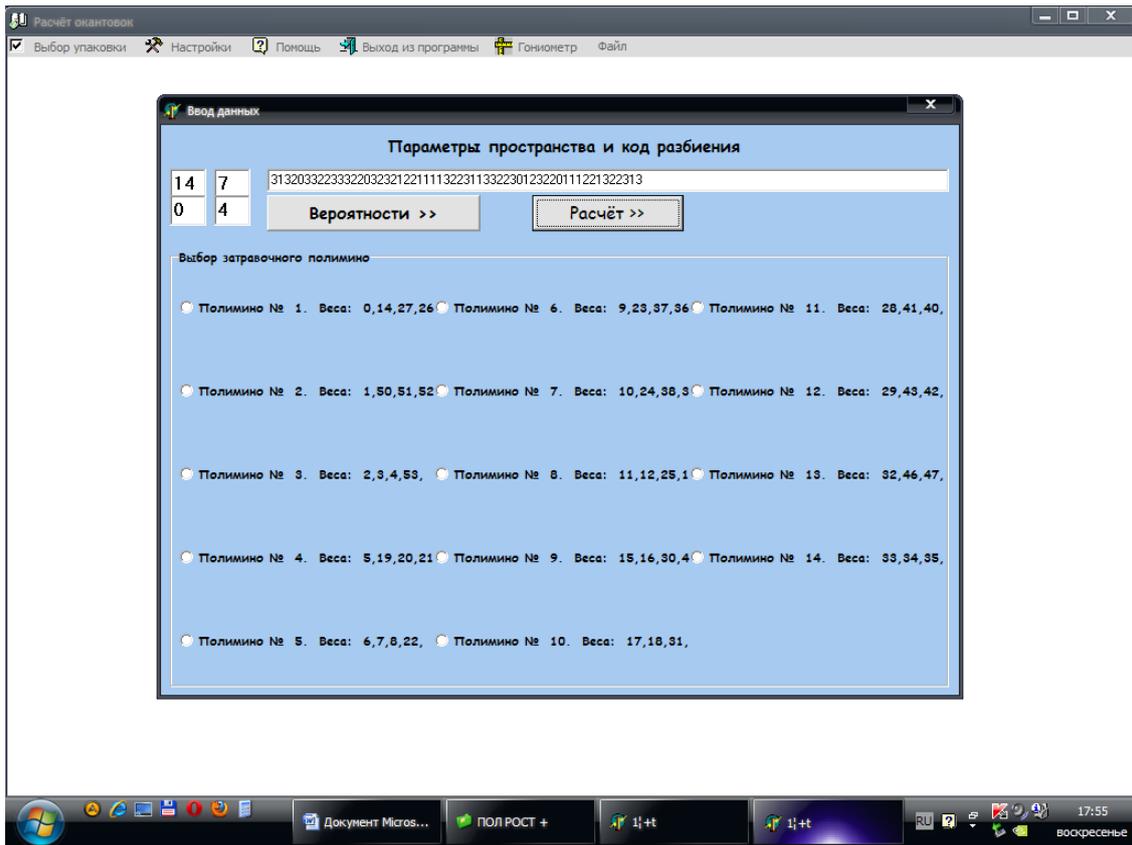


Рис. 4. Окно программы «POL.PACK»

После выбора одной из полимино в качестве «затравки», получаем разбиение, которое строится кнопкой «пробел» и параллельно выводятся числа координационной последовательности (рис.5).

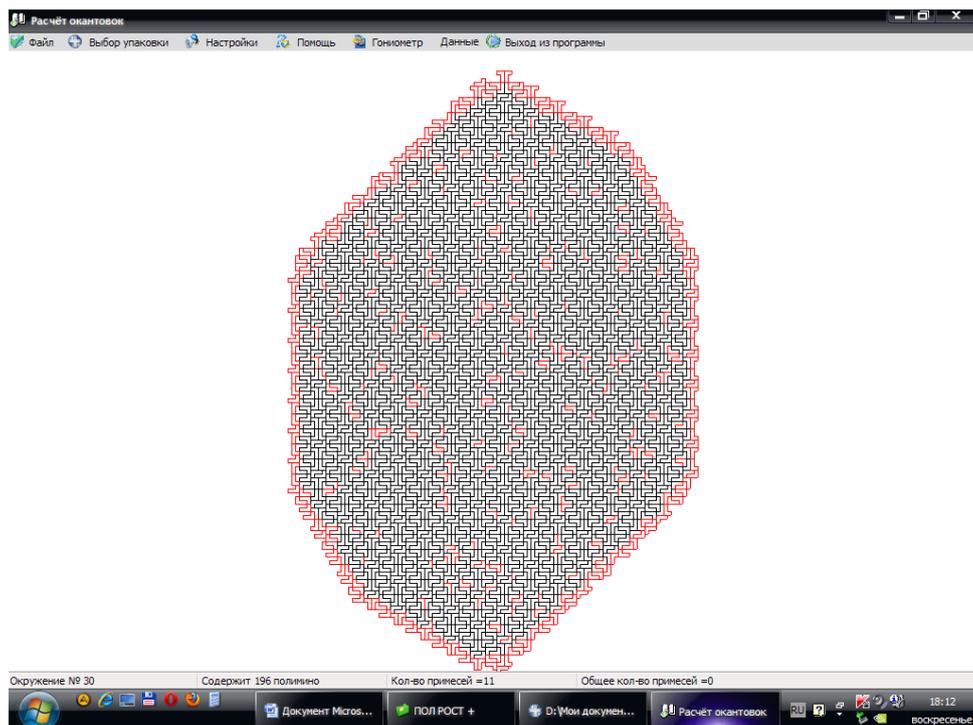


Рис. 5. Рост двумерного кристаллического «нанозародыша» с примесными молекулами -полимино. Цветом показано образование первого окружения из молекул примеси с образованием «зонарной» структуры.

### *Порядок выполнения работы*

Задание 1. Изучите возможности программы.

Задание 2. Проверьте независимость формы роста от выбора «затравочного» полимино. Сделайте вывод.

Задание 3. Подготовьте собственный пример на двумерное разбиение.

Задание 4. Проведите анализ координационных последовательностей магических чисел с помощью стандартной программы «Excel».

Задание 5. Составьте отчет.

Контрольные вопросы.

1. Какие известны основные методы выращивания кристаллов?
2. В чем заключается суть термодинамической модели зарождения кристаллической фазы?
3. Что называется упаковочным пространством в геометрической модели послойного роста?
4. Как возникают «магические числа» в модели послойного роста.

Часть 2. Расчет 3D-нанокластеров меди (Cu) и антрацена (C<sub>14</sub>H<sub>10</sub>). Анализ магических чисел. (программа «Орграф»).

*Цель работы.* Освоение программы «Орграф» для построения 3D-зародышей кристаллов.

Использование послойного роста для выявления структурообразующих контактов кристаллической структуры

Разбиение или упаковка задаёт в пространстве математический граф связности фигур разбиения. В первом приближении связанными (соседними) можно считать фигуры (вершины графа), у которых есть хотя бы одна общая грань (ребро в двумерном случае). Так как для кристаллических структур справедлив принцип плотной упаковки, разбиение или упаковку соответствующую кристаллической решётки можно получить двумя способами:

- аппроксимировать молекулы поликубами и тогда получим упаковку (или разбиение) поликубов;
- построение областей Вороного-Дирихле.

#### Области Вороного-Дирихле молекул

Между двумя любыми точками множества можно провести срединный перпендикуляр (срединную плоскость в трехмерном пространстве). Область Вороного-Дирихле точки (ячейки Вигнера-Зейтца) называют многоугольником, внутри которого нет ни одного срединного перпендикуляра.

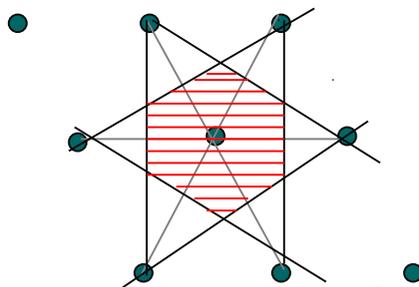


Рис. 6 Схематичное представление области Вороного-Дирихле точечной системы

Доказано, что для любой точечной системы области Вороного разбивают пространство или плоскость. Для плоскости – на выпуклые многоугольники, для пространства – на выпуклые многогранники.

Области Дирихле отличаются от областей Вороного только тем, что проводится не срединный перпендикуляр, а перпендикуляр, отстоящий от некоторых точек несколько дальше, от некоторых несколько ближе в зависимости от «весов» точек.

Геометрический смысл областей Вороного: это множество точек, которые ближе к заданному атому, чем к любому другому. Объединение областей Вороного-Дирихле атомов молекулы называют молекулярным полиэдром Вороного-Дирихле. По графу связности можно построить

многогранник роста. Изменение графа связанности (например, удаление связей соответствующих слабым контактом) приводит к изменению многогранника роста.

Таким образом, для одной кристаллической структуры можно получить целый спектр многогранников роста, сравнивая которые с реальной формой кристаллов удаётся выявить структурообразующие контакты.

Кроме того, послойный рост позволяет аналогично проводить процесс кластеризации, т.е. выделение кластеров – объединений молекул, которые участвуют в образовании кристаллической структуры.

*Экспериментальная часть.* Получить от преподавателя пакет программ «Учебно-исследовательский комплекс «Компьютерный Наноскоп».

#### *Порядок выполнения работы*

Задание 1. Получить навык работы с программой «Orgraph».

Открыть программу «Orgraph» и подпрограмму «Grow\_graph\_3D\_G1». Выбрав масштаб и вариант для изображения связи между точками графа структуры, переходим к чтению данных с исходного файла ячейки и координат структуры. На экране монитора появляется исходная точка с направленными связями. Клавиша «пробел» служит для наращивания кластера (рис. 7).

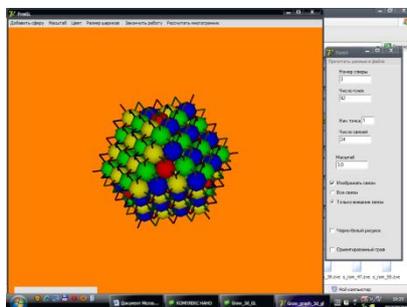


Рис. 7. Окно подпрограммы «Grow\_graph\_3D\_G1».

Данные о структуре и координационные связи, полученные на этапе построения разбиения Вороного-Дирихле, располагаются на отдельных файлах в библиотеке программы (рис.8).

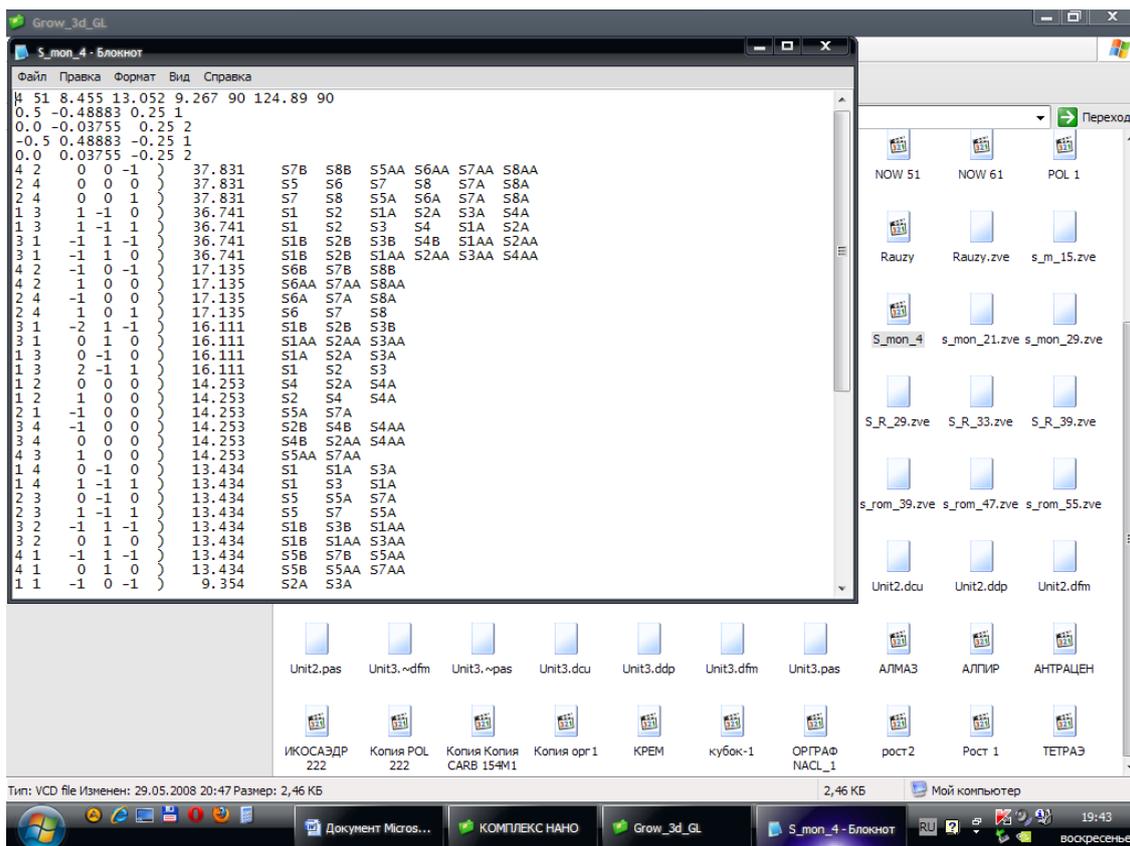


Рис.8. Данные о разбиении структуры. Содержат параметры ячейки, координаты центров масс молекул и граф соседства молекул

Задание 2. Провести исследования по построению зародышей структур с гранецентрированной ячейкой.

Задание 3. Провести исследования по построению зародышей структур молекулярных кристаллов антрацена и серы.

Задание 4. Составьте отчет по работе.

Контрольные вопросы.

1. Какие физические методы позволяют судить о структуре кристаллических зародышей?
2. Какие структуры роста кристаллов хорошо изучены и почему?
3. Приведите примеры использования кристаллов.

Часть 3. Симметрия разбиений в сверхрешетке. Некристаллографические группы симметрии. Создание моделей фотонного кристалла (2D-сверхрешетка) (комплекс программ М6 – Matrix).

*Цель работы.* Познакомиться с перестройками водородных связей в гетерокарбамидном комплексе, приводящим к различной симметрии

молекулы в кристаллах (программа «Молекулярный конструктор»). Построить варианты разбиений сверхрешетки фотонного кристалла.

### *Теория симметрии*

Симметрия – это неизменность (инвариантность) объектов и законов при некоторых преобразованиях описывающих их переменных.

При этом говорят, что система обладает симметрией относительно данного преобразования, которому она может быть подвергнута. В математике преобразования симметрии составляют группу. Фундаментальное значение симметрии в физике определяется прежде всего тем, что каждому непрерывному преобразованию симметрии отвечает закон сохранения некоторой физической величины, связанной с указанной симметрией. При дискретных преобразованиях симметрия описывает разбиения пространства. Во всякой симметричной фигуре (симметричной называется фигура, которая состоит из геометрически равных частей, закономерно расположенных относительно друг друга) является обязательным:

- 1) наличие равных частей;
- 2) их определённая закономерная повторяемость.

Закономерность в повторении равных частей симметричной фигуры может быть обнаружена с помощью некоторых вспомогательных геометрических образов, которыми являются плоскости, прямые, точки. Эти геометрические образы (точка, прямая, плоскость) называются элементами симметрии фигуры. В симметричных фигурах возможны следующие элементы симметрии: центр симметрии, плоскость симметрии, простые и сложные (зеркальные и инверсионные) оси симметрии.

Простейшим симметрическим преобразованием является отражение в плоскости симметрии.

Плоскостью симметрии называется такая плоскость в симметричной фигуре, при отражении в которой, как в двухстороннем зеркале, фигура совмещается сама с собой, Плоскость симметрии делит фигуру на две зеркально-равные части.

Представим себе равнобедренный треугольник. Эта фигура обладает одной плоскостью симметрии, перпендикулярной к плоскости фигуры и проходящей через перпендикуляр  $AO$ . Для отражения необходимо из каждой точки фигуры (например, из точки  $B$ ) опустить на плоскость симметрии перпендикуляр  $OB$  и продолжить, этот перпендикуляр на расстояние, равное  $BO = B_1O$ , и если треугольник равнобедренный, то отражение точки  $B$  совместится с точкой  $B_1$ , а отражение прямой  $BA$  – с прямой  $B_1A$ . Отражение левой половины совместится с правой половиной. Прделавав то же самое с правой половиной фигуры, мы совместим её отражение с левой половиной, и в результате вся фигура совместится сама с

собой. Итак, фигура придёт в новое состояние, ничем не отличающееся от исходного.

В кубе, форму которого имеют кристаллы большинства металлов, можно обнаружить прежде всего три взаимно перпендикулярные плоскости симметрии, которые, подобно координатным плоскостям ортогональной системы, делят пополам противоположные параллельные рёбра. Далее можно найти плоскости симметрии, проходящие по диагоналям граней куба. В итоге в кубе имеется 9 плоскостей симметрии, и все они пересекаются в одной точке – центре куба.

Простейший элемент симметрии представляет собой особая точка внутри фигуры – центр инверсии (центр симметрии). Например, точка, лежащая на пересечении диагоналей параллелограмма, характеризуется тем, что любая проведённая через неё прямая, встречает на равных расстояниях от неё соответственные (одинаковые) точки контура параллелограмма (например,  $M$  и  $M_1$ ). Эта особая точка и будет центром симметрии. Примером пространственной фигуры, симметрия которой исчерпывается наличием одного центра симметрии, служит косоугольный параллелепипед.

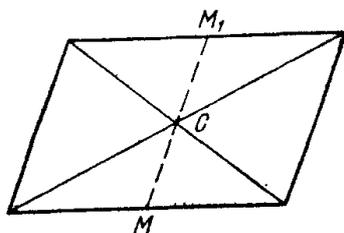


Рис.9 Центр инверсии на примере параллелепипеда

Итак, центром симметрии называется особая точка внутри фигуры, характеризующаяся тем, что по обе стороны от любой проведённой через неё прямой и на равных расстояниях от этой прямой находятся одинаковые (соответственные) точки фигуры. Рассматриваемое симметрическое преобразование в центре симметрии есть зеркальное отражение в точке.

Осью симметрии называется прямая, принадлежащая данной фигуре, при повороте вокруг которой на некоторый определённый угол фигура совмещается сама с собой. Это возможно, если, во-первых, фигура состоит из нескольких повторяющихся равных частей и, во-вторых, эти повторяющиеся равные части расположены так, что при повороте фигуры на некоторый вполне определённый угол она займёт в пространстве то же самое положение, которое она занимала до этого поворота. Только при этом на место одних её частей становятся другие равные им части. В этом случае принято говорить, что фигура совмещается сама с собой или самосовмещается.

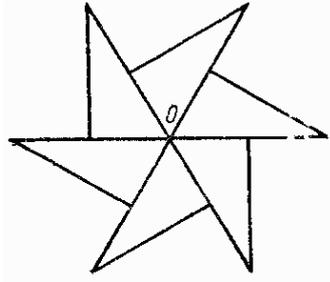


Рис. 10 Фигура с осью симметрии

Возьмём какую-либо фигуру, обладающую осью симметрии, например, состоящую из шести равных треугольников. По условию фигура должна совместиться сама с собой при повороте на некоторый угол вокруг оси симметрии. Очевидно, что ось симметрии проходит перпендикулярно к плоскости чертежа через центр фигуры. Наименьший угол поворота, при котором произойдет самосовмещение фигуры, равен 60 градусам, т.е. шестой части полного оборота вокруг оси симметрии. В данном случае рассматриваемая фигура будет иметь только один элемент симметрии – ось.

Наименьший угол, на который нужно повернуть фигуру вокруг оси симметрии, чтобы фигура самосовместилась, называется элементарным углом поворота данной оси симметрии. Для фигуры, изображённой на рис.10, он составляет 60 градусов.

Элементарный угол поворота данной оси симметрии определяет число самосовмещений фигуры при повороте её вокруг этой оси на 360 градусов, или порядок оси симметрии. Если элементарный угол поворота обозначить через  $a$ , а порядок оси симметрии – через  $n$ , то  $n=360/a$ . Доказано, что порядки осей симметрии могут быть лишь целыми числами. Рассмотренная выше фигура, состоящая из шести равных треугольников, имеет ось симметрии шестого порядка.

Оси симметрии могут иметь любой порядок. Через центр правильного треугольника перпендикулярно к плоскости чертежа проходит ось симметрии третьего порядка, через центр квадрата – четвёртого, через центр правильного пятиугольника – пятого, через центр правильного шестиугольника – шестого, и так вплоть до круга, через центр которого проходит ось симметрии бесконечного порядка. Оси конуса или цилиндра также являются осями симметрии бесконечного, так же как любой диаметр шара. Следовательно, шар обладает бесконечным числом осей симметрии бесконечного порядка.

Среди геометрических фигур, форму которых могут принимать кристаллы, нет фигур с осями пятого порядка, а также с осями симметрии, порядок которых выше шестого. Итак, кристаллические многогранники имеют лишь оси симметрии 2-, 3-, 4- и 6-порядков. Ось 2-го порядка есть в фигуре в том случае, если первое самосовмещение происходит при повороте

вокруг неё 180 градусов. Осям 3-, 4-, 6-го порядков соответствуют элементарные углы поворота на 120, 90, 60 градусов. В отличие от двойной оси их называют осями высшего порядка. В фигуре могут быть одна или несколько осей симметрии одного и того же или различных порядков.

Рассмотренные оси симметрии называются простыми. Они обозначаются цифрами, указывающими порядок оси.

При записи формулы симметрии, представляющей собой полный перечень элементов симметрии используют букву  $L$ . Порядок оси симметрии указывается в виде нижнего индекса буквы  $L$ . (Например, обозначения  $L_3$  и  $L_4$  соответствуют осям симметрии 3-го и 4-го порядков.) Число осей симметрии данной фигуры (кристалла, текстуры и т.д.) указывается перед  $L$ . (Скажем,  $4L_3$  следует расшифровать как четыре оси симметрии 3-го порядка.)

Кроме рассмотренных простых операций, выявляющих симметрию в геометрических фигурах, возможны и другие комбинированные геометрические преобразования, которые состоят из одновременного поворота и отражения либо в точке, либо в плоскости. Эти сложные геометрические преобразования описываются с помощью дополнительных элементов симметрии: инверсионных и зеркальных осей симметрии.

Зеркальной называется ось симметрии, относительно которой фигура поворачивается на элементарный угол, отражаясь одновременно в перпендикулярной к ней плоскости (это необязательно плоскость симметрии фигуры).

Инверсионной является ось симметрии, которая, обладая свойствами простой оси симметрии того же порядка, предполагает в то же время и отражение в точке как в центре симметрии. Присутствие центра симметрии в фигуре, обладающей инверсионной осью симметрии, также не обязательно.

Инверсионные оси симметрии обозначают цифрой с прямой чёрточкой, зеркальные с волнистой (тильдой).

Группы симметрии. Кроме простых и сложных элементов симметрии, присутствующих в геометрических фигурах в единичном числе, существуют вполне определённые совокупности этих элементов симметрии, которые также наблюдаются в реальных фигурах. Полная совокупность элементов симметрии геометрической фигуры называется группой (классом, видом) симметрии.

*Экспериментальная часть.* Получить от преподавателя набор геометрических пространственных фигур (многогранников) и программу «Молекулярный конструктор»

### Порядок выполнения работы

Задание 1. Дать анализ простых элементов симметрии многогранников. Выписать набор элементов симметрии для каждого многогранника.

Задание 2. Открыть программу «Молекулярный конструктор» (рис.11)

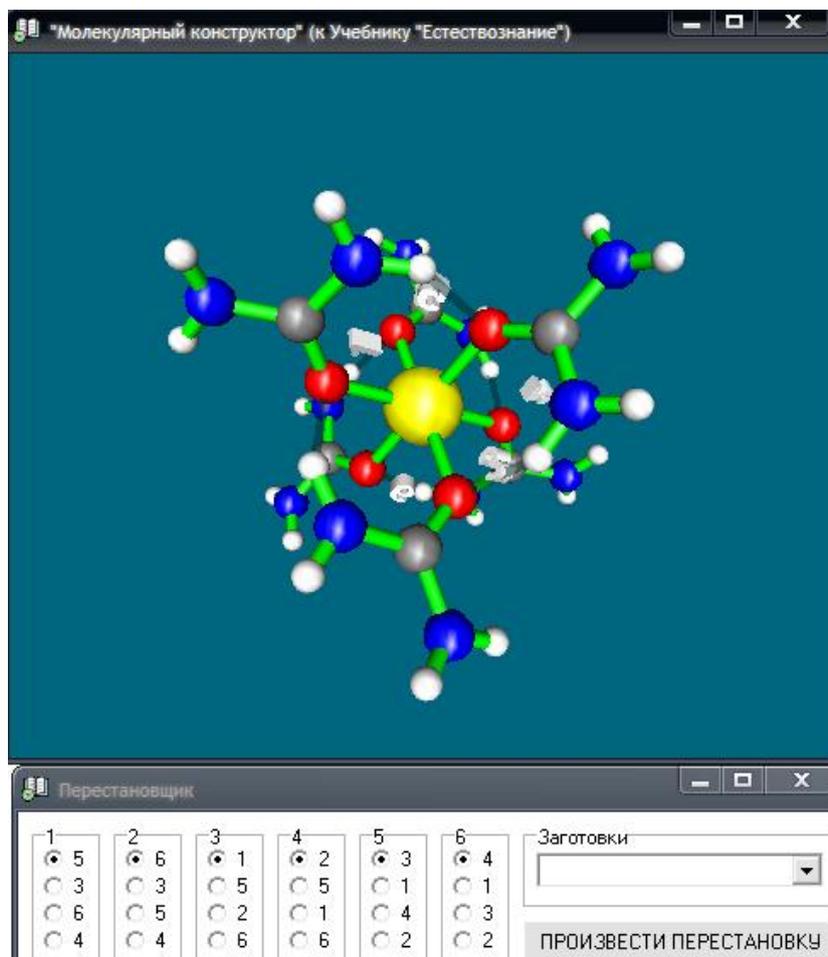


Рис. 11 Окно программы «Молекулярный конструктор»

Задание 3. Изучить возможности программы. Освоить молекулярный «дизайн».

Задание 4. Воспользовавшись подпрограммой «Перестройщик» изменить систему водородных связей в молекуле и дать анализ изменений формы молекулы.

Задание 5. Произвести поиск различных элементов симметрии молекулы для каждого случая перестройки связи.

Задание 6. Используя программу М6 построить модель фотонного кристалла с симметрией матриц Паули. Найти фигуры распространения

возмущений в среде фотонного кристалла. Сверить результаты с примером, приведенным ниже.

Группа матриц Паули

$$\begin{aligned}
 e &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} (0); & -e &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} (1); & \sigma_x = x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} (2); & \sigma_y = y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} (3); \\
 \sigma_z = z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} (4); & \sigma_{-x} = -x &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} (5); & \sigma_{-y} = -y &= \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} (6); \\
 \sigma_{-z} = -z &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} (7); & \sigma_{xy} = xy &= \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} (8); \\
 \sigma_{yx} = yx &= \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} (9); & \sigma_{yz} = yz &= \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} (10); & \sigma_{zy} = zy &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} (11); \\
 \sigma_{xz} = xz &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} (12); & \sigma_{zx} = zx &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} (13); & \sigma_{xyz} = xyz &= \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} (14); \\
 \sigma_{-xyz} = -xyz &= \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} (15).
 \end{aligned}$$

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
0	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	1	0	5	6	7	2	3	4	9	8	11	10	13	12	15	14
2	2	5	0	8	12	1	9	13	3	6	15	14	4	7	11	10
3	3	6	9	0	10	8	1	11	5	2	4	7	14	15	12	13
4	4	7	13	11	0	12	10	1	15	14	6	3	5	2	9	8
5	5	2	1	9	13	0	8	12	6	3	14	15	7	4	10	11
6	6	3	8	1	11	9	0	10	2	5	7	4	15	14	13	12
7	7	4	12	10	1	13	11	0	14	15	3	6	2	5	8	9
8	8	9	6	2	15	3	5	14	1	0	12	13	11	10	4	7
9	9	8	3	5	14	6	2	15	0	1	13	12	10	11	7	4
10	10	11	15	7	3	14	4	6	13	12	1	0	8	9	2	5
11	11	10	14	4	6	15	7	3	12	13	0	1	9	8	5	2
12	12	13	7	14	2	4	15	5	10	11	9	8	1	0	6	3
13	13	12	4	15	5	7	14	2	11	10	8	9	0	1	3	6
14	14	15	11	12	9	10	13	8	4	7	2	5	6	3	1	0
15	15	14	10	13	8	11	12	9	7	4	5	2	3	6	0	1

Рис. 12 Матрица Паули

Пример разбиения в виде гетероструктуры фотонного кристалла.

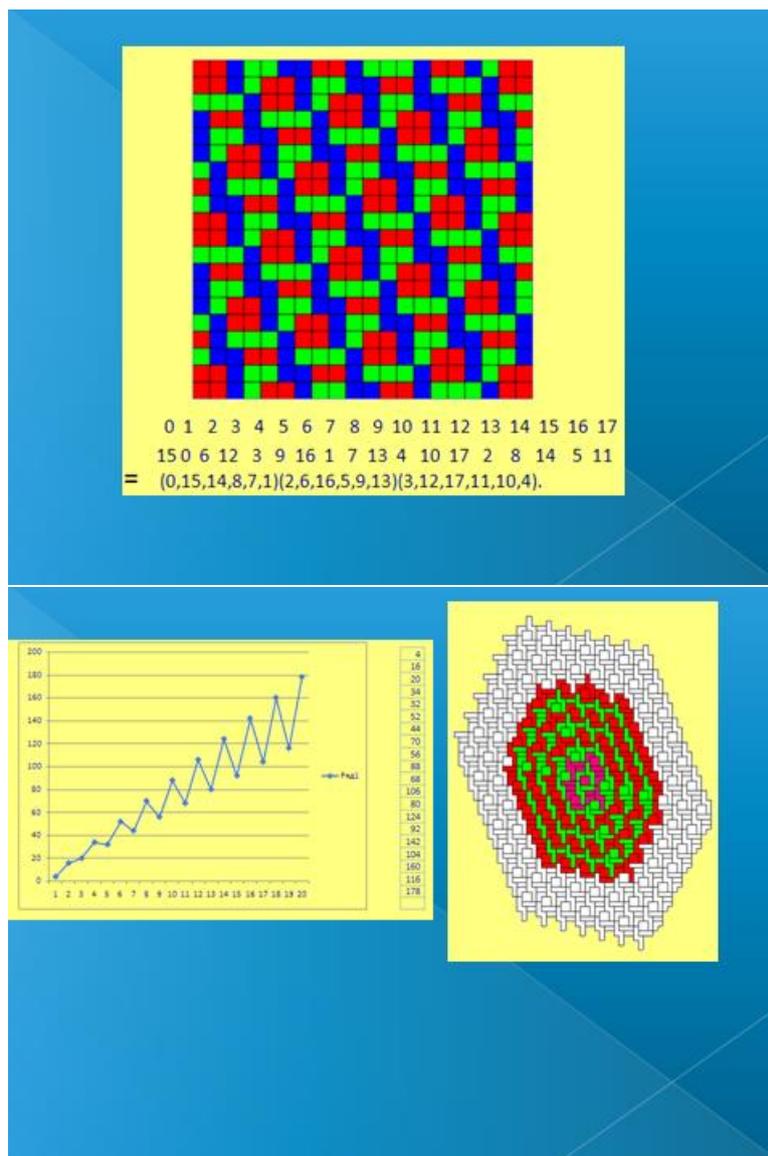


Рис. 13 Разбиение в виде кристалла

Задание 6. Составить отчет.

Контрольные вопросы.

1. Что называется «симметрией»? Каковы элементы симметрии и их действия?
2. Дать определение «группы симметрии»? Привести примеры групп симметрии в кристаллах.
3. Привести примеры проявления симметрии в природе, науке и искусстве.
4. К чему приводит нарушение симметрии в природе?
5. Что такое фотонный кристалл?

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №2

Принцип неопределенности. Соотношение неопределенности для фотонов.

*Цель работы:* Проверить применимость принципа неопределенности Гейзенберга к дифракции фотонов на щели. Рассмотреть применение волновых свойств в работе электронных микроскопов.

Соотношение неопределенностей Гейзенберга связывает неопределенность в координате микрообъекта с неопределенностью проекции импульса на эту координату:

$$\begin{aligned}\Delta p_x \Delta x &\geq \hbar \\ \Delta p_y \Delta y &\geq \hbar \\ \Delta p_z \Delta z &\geq \hbar\end{aligned}\tag{1}$$

Так как движение фотонов подчиняется соотношению неопределенностей (1), рассмотрим его применение на примере дифракции света от одной щели шириной  $a$ . Из оптики известно, что при этом на экране образуется центральный максимум, угловые размеры которого определяются положением первых минимумов в соответствии с формулой:

$$a \sin \varphi = \lambda; \quad \sin \varphi = \frac{\lambda}{a}.\tag{2}$$

С корпускулярной точки зрения фотоны, летевшие до щели параллельно оси  $x$  (рис. 1), после щели летят в основном в пределах угла  $\alpha$ :  
 $-\varphi < \alpha < \varphi$ .

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}; \quad p_y = 0; \quad p_z = 0$$

и совершенно неопределенные координаты  $x, y, z$ , то фотон, прошедший щель, имеет координату  $y$ , определенную с точностью  $\Delta y = a$ .

Ширина щели есть неопределенность координаты  $\Delta y$  для фотона, прошедшего щель. С другой стороны, то, что фотон теперь может двигаться в пределах угла  $\pm \alpha$ , означает, что у него появилась неопределенность импульса  $\Delta p_y$  в направлении оси  $y$ .

$$\Delta p_y = p_x \operatorname{tg} \varphi \approx p_x \sin \varphi\tag{3}$$

Используя соотношение (2), находим произведение  $\Delta p_y \Delta y$ :

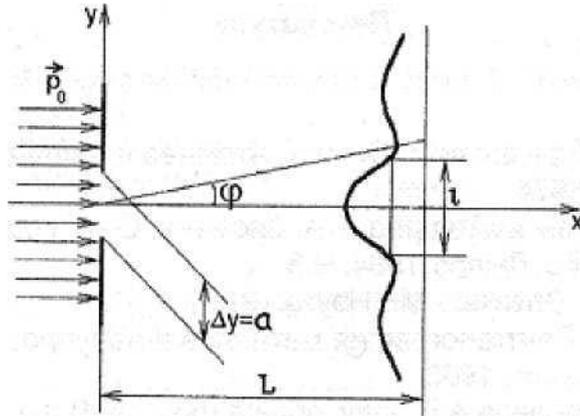


Рис.14 Схема прохождения световых лучей через щель

$$\Delta p_y \Delta y \approx p_x a \sin \varphi \approx \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \cdot \frac{\lambda}{a} a \approx 2\pi\hbar \geq \hbar.$$

Полученный результат позволяет нам рассматривать явление дифракции света как прямое следствие существования принципа неопределенности: наша попытка более точно определить координату  $y$  путём пропускания фотонов через щель приводит к возникновению неопределенности импульса  $\Delta p_y$ , в результате чего фотоны летят не вдоль оси  $X$ , как прежде, а отклоняются от этого направления. Для фотонов, попадающих на второй, третий и т.д. максимумы,  $\Delta p_y$  ещё больше. Чем уже делаем щель (уменьшаем  $\Delta y$ ), тем больше становится угловой отброс частиц (увеличивается  $\Delta p_y$ ).

#### *Экспериментальная часть*

Приборы и принадлежности. Источник света (лазер газовый учебный ПП-И09), щель с переменной шириной, экран, линейка.

Экспериментальная установка состоит из гелий-неонового лазера, дающего поток фотонов с длиной волны 0,63 мкм, щели переменной ширины и экрана. Измерив ширину  $l$  центрального дифракционного максимума на экране и расстояние от щели до экрана  $L$  при фиксированном значении ширины щели  $a = \Delta y$ , мы сможем найти  $\text{tg } \varphi = l/2L$ . Тогда

согласно (3) получим  $\Delta p_y = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \cdot \frac{l}{2L}$ , что даёт возможность определить

$\Delta p_y \Delta y$ .

#### *Порядок выполнения работы*

Задание 1. Ознакомиться с установкой и правилами безопасности при работе с лазерами.

Задание 2. Провести измерения ширины центрального дифракционного максимума при 10-15 различных размерах щели.

Вычислить среднюю неопределенность  $\Delta p_y \Delta y$ , сравнить её с теоретической величиной. Представить результаты графически в координатах ( $\Delta y$ ;  $\Delta p_y \Delta y$ ). Сделать вывод.

#### Контрольные вопросы

1. Рассказать о корпускулярно-волновой природе света и частиц. Волны де Бройля. Дифракция электронов.
2. Соотношение неопределенностей Гейзенберга.
3. Дать интерпретацию на основе соотношения неопределенностей явлению дифракции лазерного излучения на щели.

### ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №3

Спектральный анализ. Спектральные методы в нанотехнологии, (Волновой рентгенофлуоресцентный спектрометр последовательного анализа «ARL ADVANT'X»).

*Цель работы:* Исследование атомных спектров. Применение рентгенофлуоресцентного спектрометра.

*Теория спектрального анализа.*

Строение атомов по Бору. Изучение спектров атомов показало, что атомы каждого химического элемента излучают свой характерный спектр, не совпадающий со спектрами атомов других элементов.

Характер спектров объясняется свойствами излучающих атомов. Объяснение этому стало возможным после того как появилась квантовая теория Планка и основанная на ней теория атомов.

Рассмотрим атом водорода и сходные с ним ионы (водородоподобные атомы), т.е. предположим, что имеется атомная система, состоящая из ядра с зарядом  $+Ze$  и одного электрона с зарядом  $e$  ( $Z$  – порядковый номер элемента в таблице Менделеева). Можно показать, что полная энергия электрона равна сумме потенциальной и кинетической энергий (в СИ):

$$E = E_{\text{п}} + E_{\text{к}} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{mv^2}{2}$$

или

$$E = E_{\text{п}} + E_{\text{к}} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{mv^2}{2}, \quad (1)$$

где  $r$  – радиус орбиты электрона,  $v$  – скорость вращения его,  $m$  – масса электрона,  $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{Ф/м}$  – электрическая постоянная.

Электрон движется по круговой орбите с ускорением (центростремительное ускорение). Поэтому согласно классической теории он должен непрерывно излучать энергию; при этом электрон будет приближаться к ядру и через небольшой промежуток времени упадёт на ядро. Однако, в действительности атом излучает лишь линейчатый спектр и является устойчивой системой.

Выход из создавшегося положения в физике был предложен Бором (1913г.). Основываясь на гипотезе Планка о квантовом характере излучения света, Бор сформулировал законы движения электрона в атоме в виде трёх постулатов, которые позволили объяснить экспериментальные факты:

- 1 Вращаясь по стационарным орбитам, электрон не излучает.

2 Излучение происходит лишь при переходе электрона из стационарного состояния с большим значением энергии  $E_1$  в другое стационарное состояние с меньшим значением энергии  $E_2$ , при этом излучается квант энергии

$$h\nu = E_1 - E_2, \quad (2)$$

где  $\nu$  – частота света. Это условие получило название правила частот Бора.

3 Электрон в атоме может вращаться только по строго определённым стационарным орбитам, радиус которых определяется из условия

$$M = n \frac{h}{2\pi}, \quad (3)$$

где

$$M = mvr \quad (4)$$

$h = 6,63 \cdot 10^{-34}$  Дж с – постоянная Планка,  $n$  – главное квантовое число ( $n=1,2,3,\dots$ ), определяющее принадлежность электрона к той или иной орбите,  $M$  – момент количества движения.

Условие (3) получило название правила отбора или правила квантования орбит.

Применяя постулаты Бора к рассмотренной выше модели «атома», можно вычислить радиусы стационарных орбит и полную энергию электрона соответственно по формулам:

$$r = \frac{\varepsilon_0 h^2 n^2}{\pi m Z e^2}, \quad (5)$$

$$E = -\frac{1}{n^2} \frac{Z^2 m e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^2}. \quad (6)$$

Спектральные закономерности. По второму постулату Бора атомная система из ядра и одного электрона, переходя из стационарного состояния, характеризуемого квантовым числом  $n_j$  в состояние с квантовым числом  $n_i$  ( $n_i < n_j$ ) испускает линии спектра с частотами

$$\nu_{i,j} = \frac{E_j}{h} - \frac{E_i}{h} = \frac{Z^2 m e^4 c}{8 \varepsilon_0^2 h^3 c} \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right), \quad (7)$$

где  $c$  – скорость света.

Величина

$$R = \frac{me^4}{8ch^3 \varepsilon_0^2} \quad (8)$$

называется постоянной Ридберга.

Так как  $\nu_{i,j} = \frac{c}{\lambda_{i,j}}$ , то формулу можно переписать в виде

$$\frac{1}{\lambda_{i,j}} = RZ^2 \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right). \quad (9)$$

Из формулы (9) следует, что все линии в спектре могут быть объединены в серии этой формулой, если полагать  $n_i = const$ . Другими словами, каждая серия возникает при переходе электрона с вышележащих орбит  $n_j$  на орбиту с данным квантовым числом  $n_i$  причём  $j = i + 1, i + 2, i + 3$  и т.д. Для водорода ( $Z=1$ ) основные серии получаются при  $n_i = 1$  – серия Лаймана,  $n_i = 2$  – серия Бальмера,  $n_i = 3$  – серия Пашена,  $n_i = 4$  – серия Брэкета,  $n_i = 5$  – серия Пфунда.

Некоторые серии спектра водорода, в частности серия Бальмера, были изучены экспериментально до создания теории Бора. Видимая часть линейчатого спектра водорода (серия Бальмера) состоит из ряда линий, наиболее яркими из которых являются следующие четыре: красная, голубая и две фиолетовых.

Анализ спектров различных веществ проводится путем возбуждения атомов в плазме электрического разряда, в плазме дуги или искры. В некоторых простых случаях можно наблюдать излучение атомов и в обычном пламени. Промышленное исследование состава веществ часто производится визуально на приборах, называемых стилоскопами (от слова «стилл» – сталь). Этот подход является частью общего метода исследования вещества, называемого спектральным анализом.

*Экспериментальная часть.* Работа заключается в ознакомлении с теорией излучения атомов и знакомстве с приборами для спектрального анализа.

*Порядок выполнения работы*

Задание 1. Изучить основы теории Бора. Ознакомиться по инструкции с устройством и работой стилоскопа (СЛ-11).

Задание 2. Произвести наблюдение спектра излучения атомов железа в стали. Отметить его особенности.

Задание 3. Получить от преподавателя исследуемое вещество и определить его состав по табличным данным.

Задание 4. Изучить инструкцию к волновому рентгенофлуоресцентному спектрометру последовательного анализа «ARL ADVANT'X». Приготовить образец для исследований. Получить у преподавателя результаты определения химического состава приготовленного образца.

Волновой рентгенофлуоресцентный спектрометр последовательного анализа ARL ADVANT'X.

Рентгенофлуоресцентный анализ (РФА) основан на сборе и последующем анализе спектра, полученного путём воздействия на исследуемый материал рентгеновским излучением. РФА – один из современных спектроскопических методов исследования вещества с целью получения его элементного состава. С помощью него могут анализироваться различные элементы от бериллия (*Be*) до урана(*U*) в динамическом диапазоне измерений от уровней *ppm* до 100%, что позволяет решать широкий диапазон задач: от анализа основных элементов и примесей, до мониторинга следов элементов в твердых или жидких, проводящих или непроводящих образцах. Основными преимуществами данного анализа перед другими методами являются: простая подготовка проб, высокая скорость и точность анализа.

Основными вариантами представления проб являются:

- твердый диск из металла или синтетического материала, толщиной до 30мм и диаметром от 10мм до 52мм;
- монослойное покрытие, имеющее или не имеющее общих элементов с подложкой;
- гетерослойное (до 9 слоев) покрытие на подложке;
- маленький кусочек твердого образца размером до 2 мм;
- порошковый образец;
- жидкий образец;
- фильтр аэрозольного образца.

Спецификация

Рабочей средой для анализа твердых проб и прессованных порошков является вакуум (~ 2 Па) или гелий для анализа непрессованных порошков и жидкостей. Рентгеновская трубка с *Rh*анодом, торцевым *Be* окном, запитывается высокочастотным полупроводниковым генератором, мощностью 4,2 кВт.

Для регистрации используется многоканальный анализатор, обеспечивающий регистрацию до 2Мимп/сек.



Для количественного анализа используется стандартная калибровка.

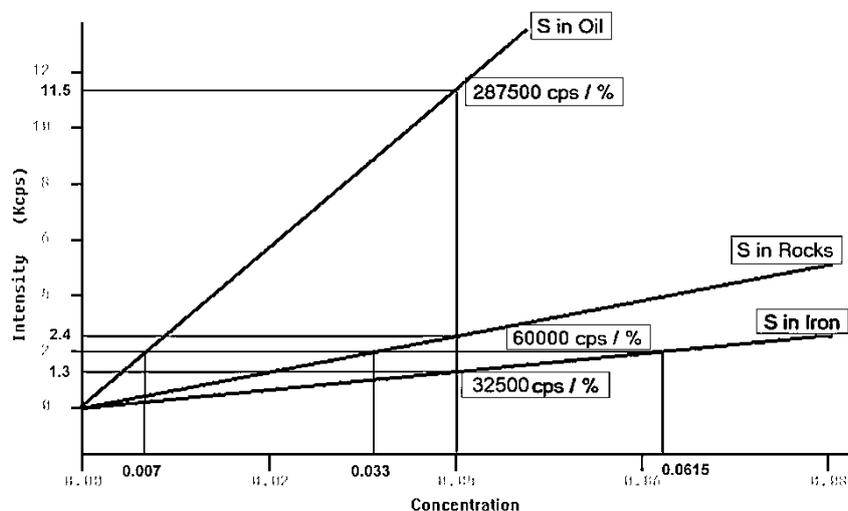


Рис. 16 Калибровочный график анализа серы

При калибровке определенной матрицы используются стандарты для этой матрицы, которые перекрывают диапазон концентраций неизвестных анализируемых проб. На рисунке показаны графики анализа серы в 3-х различных матрицах. Хорошо видно, что кривая графика меняется в зависимости от измеряемых матриц.

Следовательно, в таких калибровках  $S$  и др. легкие элементы можно точно определять только на правильно подобранном калибровочном графике.

Результаты анализа отображаются в нескольких видах (рис.17).

UniQuant 5.56 Licensee: VLADIMIR STATE UNIVERSITY-R using ADVANT'XP

E = Edit X = eXcel W = Wordpad

C:\UQ5\USER\ARL\JOB\JOB.002 Fosforins

Compound	m/m%	StdErr	El	m/m%	StdErr
CaO	49.61	0.25	Ca	35.47	0.18
SO3	41.31	0.25	Sr	16.54	0.10
SiO2	3.85	0.10	Si	1.80	0.04
P2O5	2.38	0.08	Px	1.04	0.03
F	1.85	0.12	F	1.85	0.12
Na2O	0.288	0.014	Na	0.214	0.011
Al2O3	0.213	0.011	Al	0.113	0.006
SrO	0.207	0.010	Sr	0.175	0.009
MgO	0.150	0.007	Mg	0.0903	0.0045
Fe2O3	0.0494	0.0025	Fe	0.0346	0.0017
TiO2	0.0247	0.0014	Ti	0.0148	0.0008
K2O	0.0137	0.0007	K	0.0114	0.0006
Cl	0.0132	0.0007	Cl	0.0132	0.0007

KnownConc= 0 REST= 0 D/S= 0  
Sum Conc's before normalisation to 100% : 75.0 %

back print send alt

UniQuant 5.56 Licensee: VLADIMIR STATE UNIVERSITY-R using ADVANT'XP

O = Ox <<> El L = Lanth LowZ X = eXcel P = ppm show Show: ppm > 100

C:\UQ5\USER\ARL\JOB\JOB.002 Fosforins

Z	m/m%	StdErr	Z	m/m%	StdErr	Z	m/m%	StdErr
SumBe..F	1.85	0.12	29 CuO	<		52 TeO2	<	
11+Na2O	0.288	0.014	30+ZnO	<		53 I	<	
12+MgO	0.150	0.007	31 Ga2O3	<		55 Cs2O	<	
13+Al2O3	0.213	0.011	32 GeO2	<		56 BaO	<	
14+SiO2	3.85	0.10	33 As2O3	<		SumLa..Lu	0.024	0.030
15+P2O5	2.38	0.08	34 SeO2	<		72 HfO2	<	
15 P			35 Br	<		73 Ta2O5	<	
16+SO3	41.31	0.25	37 Rb2O	<		74 WO3	<	
16 S			38+SrO	0.207	0.010	75 Re2O7	<	
17+Cl	0.0132	0.0007	39+Y2O3	<		76 OsO4	<	
18 Ar	<		40+ZrO2	<		77 IrO2	<	
19+K2O	0.0137	0.0007	41 Nb2O5	<		78 PtO2	<	
20+CaO	49.61	0.25	42 MoO3	<		79 Au	<	
21+Se2O3	<		44 RuO4	<		80 HgO	<	
22+TiO2	0.0247	0.0014	45 Rh2O3	<		81 Tl2O3	<	
23 V2O5	<		46 PdO	<		82 PbO	<	
24+Cr2O3	<		47 Ag2O	<		83 Bi2O3	<	
25+MnO	<		48 CdO	<		90+ThO2	<	
26+Fe2O3	0.0494	0.0025	49 In2O3	<		92 U3O8	<	
27 Co3O4	<		50+SnO2	<		94+PuO2	<	
28+NiO	<		51 Sb2O3	<		95 Am2O3	<	

KnownConc= 0 REST= 0 D/S= 0  
Sum Conc's before normalisation to 100% : 75.0 %

color back print send alt

Рис. 17 Окно вывода результатов

Результаты сохраняются в формате .rtf или .doc.

VLADIMIR STATE UNIVERSITY - RU

C:\UQ5\USER\ARL\JOB\JOB.002 2011-12-15

Fosforins

ARL ADXP-2399 Rh 60kV LiF200 PET AX03 LiF220 Method : X\_UQ.

C:\UQ5\USER\ARL\Appl\AnySample.kap 2011-07-14

Calculated as : Oxides Matrix (Shape & ImpFc) : 1|Teflon

X-ray path = Vacuum Film type = No supporting film

Case number = 0 All known  
 Eff.Diam. = 25.0 mm Eff.Area = 490.6 mm<sup>2</sup>  
 KnownConc = 0 %  
 Rest = 0 % Viewed Mass = 18000.00 mg  
 Dil/Sample = 0 Sample Height = 2.00 mm

Compound	m/m%	StdErr	El	Weight%	StdErr
CaO	49.61	0.25	Ca	35.47	0.18
SO <sub>3</sub>	41.31	0.25	Sx	16.54	0.10
SiO <sub>2</sub>	3.85	0.10	Si	1.80	0.04
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	2.38	0.08	Px	1.04	0.03
F	1.85	0.12	F	1.85	0.12
Na <sub>2</sub> O	0.288	0.014	Na	0.214	0.011
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.213	0.011	Al	0.113	0.006
SrO	0.207	0.010	Sr	0.175	0.009
MgO	0.150	0.007	Mg	0.0903	0.0045
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.0494	0.0025	Fe	0.0346	0.0017
TiO <sub>2</sub>	0.0247	0.0014	Ti	0.0148	0.0008
K <sub>2</sub> O	0.0137	0.0007	K	0.0114	0.0006
Cl	0.0132	0.0007	Cl	0.0132	0.0007

KnownConc= 0 REST= 0 D/S= 0  
 Sum Conc's before normalisation to 100% : 75.0 %  
 Total % stripped Oxygen: 42.603

Помимо количественного анализа, возможен расчет толщины слоев гетерослойного покрытия (с толщиной от 1mg/10mmØ), зная химический состав подложки и каждого слоя. Пример результата расчета приведен ниже.

D:\UQ5\USER\ODS\JOB\JOB.634 Steel + 10nm Cr + 25nm Cr203

Results for mass and thickness of layers

##	LayerMaterial	U/F	mg/m2	/	g/cm3 =	nm	nmSigma	%Sigma
1	Cr	U	100.8	/	7.200 =	14.0	0.31	2.2
2	Cr203	U	140.7	/	5.210 =	27.0	1.26	4.7

Задание 5. Подготовить отчет.

## Библиографический список

1. Нанотехнологии. Наноматериалы. Наносистемная техника. Мировые достижения //сб. под ред. П.П. Мальцева – М: Техносфера, 2008. – 432 с.
2. Рау В.Г., Аракелян С.М. Курс лекций по статистической физике и термодинамике (с элементами наноструктурного анализа). (Электронный учебник)// – ВлГУ, 2013г.
3. Старостин В.В. Материалы и методы нанотехнологии (учебное пособие)// – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2008. – 431 с.
4. Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии// – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. – 416 с.
5. Суздальев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов// – М.: КомКнига, 2006. – 592 с.
6. Васильев Е.К. Качественный рентгенофазовый анализ// Под ред. С. Б. Брандта – Новосибирск: Наука, 1986. – 195 с.
7. Арутюнов П.А., Толстихина А.Л., Демидов В.Н. Система параметров для анализа шероховатости и микрорельефа поверхности материалов в сканирующей зондовой микроскопии// Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 1998. – Т. 65. – 41 с.
8. Недома И. Расшифровка рентгенограмм порошков // Под ред. Л.Н. Расторгуева. – М.: Металлургия, 1975. – 423 с.
9. Миркин Л.И. Рентгеноструктурный анализ: Индицирование рентгенограмм: Справочное руководство// – М.: Наука, 1981. – 495 с.