FIZIKA ČVRSTOG STANJA I

Prvi probni kolokvij 02.04.2020.

1. Pokažite da je za monoatomnu dijamantnu rešetku strukturni faktor jednak

$$S_{\mathbf{K}} = 1 + \exp\left[2\pi i\left(h+k+l\right)\right]$$

$$= \begin{cases} 2, & h+k+l \text{ je dvostruki parni broj;} \\ 1 \pm i, & h+k+l \text{ je neparan;} \\ 0, & h+k+l \text{ je dvostruki neparni broj.} \end{cases}$$

gdje su h, k i l komponente za $\mathbf{K}$ u bazi koju čine primitivni vektori recipročne rešetke. Interpretirajte ove rezultate geometrijski.

2. Za elastično raspršenje rendgenskog zračenja na kristalu, pokažite da maksimalni iznos vektora recipročne rešetke $K = |\mathbf{K}|$ ovisi o valnom vektoru fotona $k = |\mathbf{k}|$. Uvjerite se da smo dokazano svojstvo prešutno koristili za zadatke na vježbama, recimo, u zadatku 5.3.

1.

Monoatomna dijamantna rešetka je fcc s bazom

$$d_1 = 0$$

$$d_2 = \frac{a}{4}\left(\vec{e}_x + \vec{e}_y + \vec{e}_z\right)$$

gdje je a konstanta rešetke. Recipročna rešetka je bcc čija je konstanta $4\pi/a$. Primitivni vektori su

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{e}_y + \vec{e}_z - \vec{e}_x\right)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{e}_z + \vec{e}_x - \vec{e}_y\right)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{e}_x + \vec{e}_y - \vec{e}_z\right)$$

Strukturni faktor

$$S_{\vec{K}} = \sum_{j=1}^{n} e^{i\vec{K}\cdot\vec{d}_j}$$

gdje je

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

Računamo skalarne produkte

$$\vec{K}\cdot\vec{d}_1 = 0$$

$$\vec{K}\cdot\vec{d}_2 = \left(h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3\right)\cdot\frac{a}{4}\left(\vec{e}_x + \vec{e}_y + \vec{e}_z\right)$$

$$\vec{b}_1\cdot\vec{e}_x = -\frac{2\pi}{a} \qquad \vec{b}_1\cdot\vec{e}_y = \frac{2\pi}{a} \qquad \vec{b}_1\cdot\vec{e}_z = \frac{2\pi}{a}$$

$$\vec{b}_2\cdot\vec{e}_x = \frac{2\pi}{a} \qquad \vec{b}_2\cdot\vec{e}_y = -\frac{2\pi}{a} \qquad \vec{b}_2\cdot\vec{e}_z = \frac{2\pi}{a}$$

$$\vec{b}_3\cdot\vec{e}_x = \frac{2\pi}{a} \qquad \vec{b}_3\cdot\vec{e}_y = \frac{2\pi}{a} \qquad \vec{b}_3\cdot\vec{e}_z = -\frac{2\pi}{a}$$

Imamo

$$\vec{K}\cdot\vec{d}_2 = \frac{a}{4}\cdot\frac{2\pi}{a}\cdot\left[h+k+l\right] = \frac{\pi}{2}(h+k+l)$$

pa je strukturni faktor

$$S_{\vec{K}} = 1 + \exp\left[\frac{\pi}{2}(h+k+l)\right]$$

$$= \begin{cases} 2; & h+k+l \text{ je dvostruki parni broj} \\ 1\pm i; & h+k+l \text{ je neparni broj} \\ 0 & h+k+l \text{ je dvostruki neparni broj} \end{cases}$$

Koja je geometrijska interpretacija? Napišimo $\vec{K}$ u obliku

$$\vec{K} = \frac{4\pi}{a}\left(n_1\vec{e}_x + n_2\vec{e}_y + n_3\vec{e}_z\right)$$

gdje smo uvrstili vektore $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$ i $\vec{b}_3$ i gdje je

$$n_j = \frac{1}{2}(h+k+l) - h_j$$

$$h_1 \equiv h;\quad h_2 \equiv k;\quad h_3 \equiv l$$

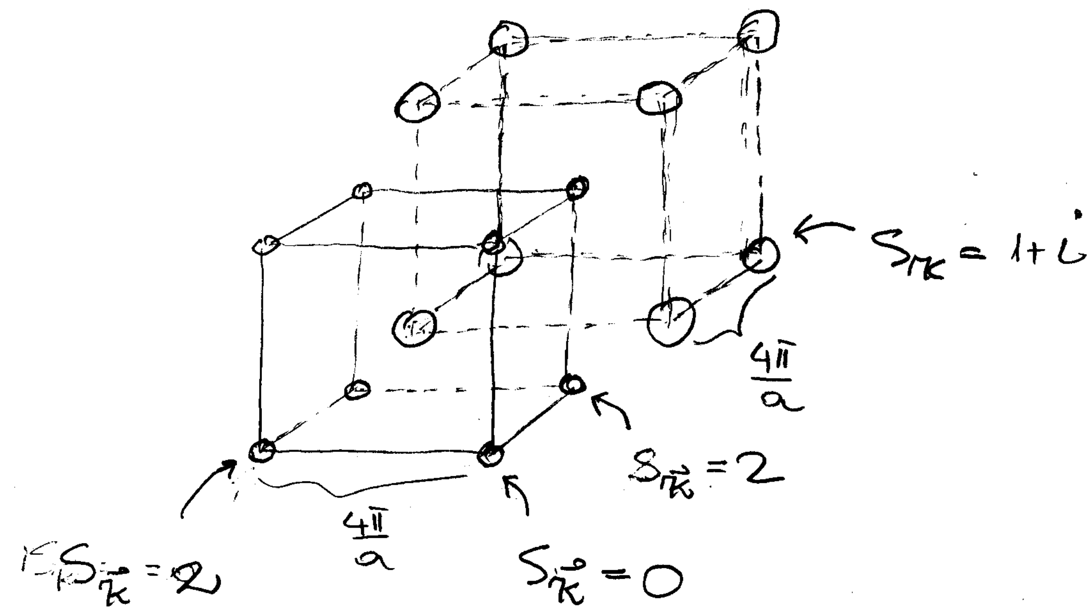
Ako shvatimo bcc recipročnu rešetku kao dvije obične kubne rešetke onda za

$$h+k+l = \text{dvostruki parni broj ili dvostruki neparni broj}$$

obilazimo vrhove obične kubne rešetke koja uključuje ishodište i vrhove bcc rešetke jer su tada n_1, n_2 i n_3 cijeli brojevi.
Ako je

$$h+k+l = \text{neparni broj}$$

obilazimo vrhove obične kubne rešetke koji mogu ishodište u unutrašnjosti bcc rešetke jer su tada n_1, n_2 i n_3 polucijeli brojevi.



Ako iz ove rešetke maknemo točke sa $S_{\vec K} = 0$ dobit ćemo fcc rešetku umjesto obične kubne rešetke za čvorove

$h+k+l$ dvostruki parni broj

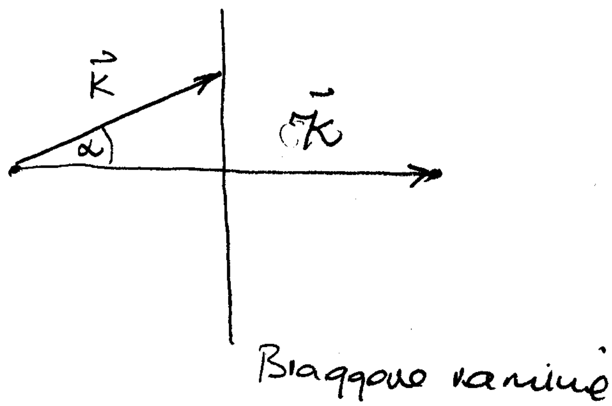
Ova fcc rešetka imat će duljinu stranice $8\pi/a$!

2.

Uvjet za ~~za~~ konstruktivnu interferenciju pri elastičnom raspršenju X-zraka na kristalu je

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

Što je von Laue-ov uvjet.



Kvadriramo li ovaj uvjet

$$k^2 = (\vec{k} - \vec{K})^2 = k^2 - 2\vec{k}\cdot\vec{K} + \vec{K}^2$$

odnosno,

$$K^2 - 2kK\cos\alpha = 0$$

$$K(K - 2k\cos\alpha) = 0$$

$K, k > 0$ pa je

$$\cos\alpha = \frac{K}{2k} \leq 1$$

Uvjet za maksimalni K je

$$\boxed{K_{max} = 2k}$$

U zadatku 5.3 je

$$k = 4{,}19 \cdot 10^{8}\ \mathrm{cm}^{-1}$$

dok je za uzorak A

$$a = 4{,}29 \cdot 10^{-8}$$

Maksimalni K kojeg mo uzeli je

$$K' = \frac{4\pi}{a} \cdot 1{,}66 = \frac{4\pi}{4{,}29 \cdot 10^{-8}} \cdot 1{,}66$$

$$= 4{,}86 \cdot 10^{8}\, cm^{-1}$$

Vidimo da je

$$K' < K_{max} = 2K = 8{,}38 \cdot 10^{8}\, cm^{-1}$$

U uzorku C je

$$a = 3{,}56 \cdot 10^{-8}\, cm$$

$$K' = \frac{4\pi}{a} \cdot 2{,}31 = \frac{4\pi}{3{,}56 \cdot 10^{-8}} \cdot 2{,}31 = 8{,}15 \cdot 10^{8}\, cm^{-1}$$

pa i dalje vrijedi

$$K' < K_{max} < 2K$$