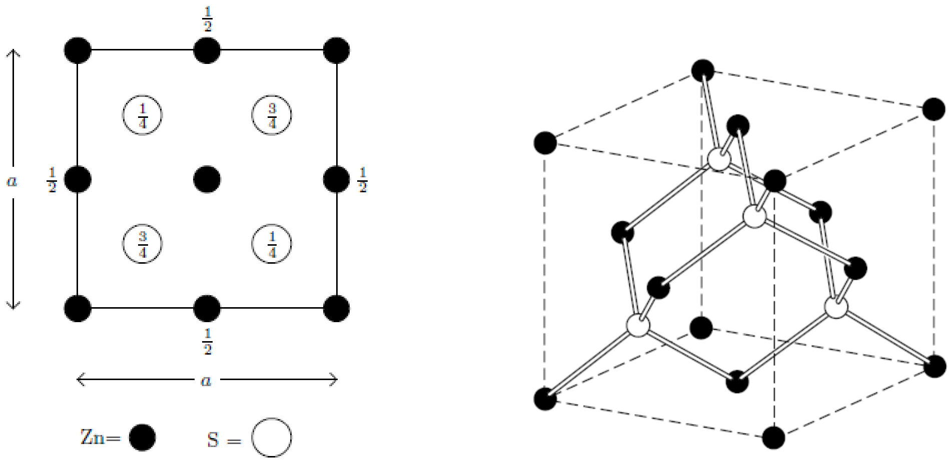
**SVEUČILIŠTE U RIJECI, ODJEL ZA FIZIKU**

***Diplomski studij Fizika*** **Ak. god. 2019./2020.**

# FIZIKA ČVRSTOG STANJA I

## Prvi kolokvij 24.04.2020.

**1.** Na slici je prikazana sfaleritna (cink-blend) kristalna struktura ZnS iz tlocrta (lijeva slika) i 3D slika (desna slika). To je, ustvari, dijamantna struktura s dvije vrste atoma: Zn (crne kuglice) i S (bijele kuglice). Brojevi na nekim kuglicama označavaju visinu u odnosu na $z$ = 0 ravninu kao omjer visine i konstante rešetke. Atomi kojima nisu pridružene visine nalaze se na $z$ = 0 ili $z$ = $a$.
(a) O kojoj se temeljnoj Bravaisovoj rešetki radi?
(b) Opišite bazu rešetke.
(c) Ako je konstanta reštke $a$ = 0,541 nm izračunajte udaljenost najbližih susjednih atoma Zn-Zn, Zn-S i S-S.




**2.** Analizirani su praškasti uzorci za tri različita monoatomna kubna kristala A, B i C Debye-Scherrerovom metodom. Dobiveni su difrakcijski prstenovi koji odgovaraju kutovima u donjoj tablici. Poznato je da je jedan kristal bcc, drugi fcc i treći dijamantna rešetka.

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $\phi_A$ | 30° | 35° | 50° | 60° |
| $\phi_B$ | 21° | 29° | 36° | 42° |
| $\phi_C$ | 30° | 50° | 60° | 74° |

(a) Odredite kristalnu strukturu uzoraka A, B i C.
(b) Valna duljina upadnog rendgenskog zračenja iznosi $\lambda$ = 0,95 Å. Kolika je konstanta rešetke za svaku od struktura?

**1.**

(a) Radi se o fcc rešetki s bazom.

(b) U bazi se nalaze dva atoma:

Zn na položaju $(0,0,0)$

S na položaju $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right)$ ili $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{4}\right)$

(c) Najbliži susjedi

Zn-Zn $\quad a\frac{\sqrt{2}}{2} = 0{,}541 \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} = 0{,}383 \text{ nm}$

Zn-S $\quad a\sqrt{\left(\frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{4}\right)^2} = 0{,}234 \text{ nm}$

S-S $\quad$ Ako je jedan atom na $\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right)$ a drugi na $\left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$ imamo

$$d_{S-S} = a\sqrt{\left(\frac{3}{4} - \frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{4} - \frac{3}{4}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{a}{\sqrt{2}} = 0{,}383 \text{ nm}$$

2.

Ovaj je zadatak sličan zadatku 5.3; poslužit ću se nekim rezultatima iz tog zadatka.

Braggov zakon

$$\mathcal{K} = 2k \sin\frac{\Phi}{2}$$

$\lambda = 0{,}95\ \text{Å} = 0{,}95 \cdot 10^{-8}\ \text{cm}$

$k = \frac{2\pi}{\lambda} = 6{,}61 \cdot 10^{8}\ \text{cm}^{-1}$

Uzorak A

$30° \ldots \quad \mathcal{K} = 2 \cdot 6{,}61 \cdot 10^{8} \cdot \sin\frac{30}{2} = 3{,}42 \cdot 10^{8}\ \text{cm}^{-1}$

$35° \ldots \quad \mathcal{K} = 3{,}98 \cdot 10^{8}\ \text{cm}^{-1}$

$50° \ldots \quad \mathcal{K} = 5{,}6 \cdot 10^{8}\ \text{cm}^{-1}$

$60° \ldots \quad \mathcal{K} = 6{,}61 \cdot 10^{8}\ \text{cm}$

Uzorak B

$21° \ldots \quad \mathcal{K} = 2{,}41 \cdot 10^{8}\ \text{cm}^{-1}$

$29° \ldots \quad \mathcal{K} = 3{,}31 \cdot 10^{8}\ \text{cm}^{-1}$

$36° \ldots \quad \mathcal{K} = 4{,}09 \cdot 10^{8}\ \text{cm}^{-1}$

$42° \ldots \quad \mathcal{K} = 4{,}74 \cdot 10^{8}\ \text{cm}^{-1}$

Uzorak C

$30° \ldots \quad \mathcal{K} = 3{,}42 \cdot 10^{8}\ \text{cm}^{-1}$

$50° \ldots \quad \mathcal{K} = 5{,}6 \cdot 10^{8}\ \text{cm}^{-1}$

$60° \ldots \quad \mathcal{K} = 6{,}61 \cdot 10^{8}\ \text{cm}^{-1}$

$74° \ldots \quad \mathcal{K} = 7{,}97 \cdot 10^{8}\ \text{cm}^{-1}$

Promotrajmo najprije fcc Bravaisovu rešetku, odnosno, bcc recipročnu rešetku. Budući da ne znamo konstantu rešetke a, moramo računati s omjerima recipročnih vektora.

Uzmimo vektore iz bcc recipročne rešetke

$$\vec{K}_1 = \frac{4\pi}{a}\,\vec{e}_z$$

$$\vec{K}_2 = \frac{4\pi}{a}\left(\vec{e}_z + \vec{e}_y\right)$$

$$\vec{K}_3 = \frac{4\pi}{a}\cdot\frac{1}{2}\left(\vec{e}_x + \vec{e}_y + \vec{e}_z\right)$$

$$\vec{K}_4 = \frac{4\pi}{a}\cdot\left[\frac{1}{2}\left(\vec{e}_x + \vec{e}_y\right) + \frac{3}{2}\,\vec{e}_z\right]$$

i omjere iznosa (iz zadatka 5.3)

$$\frac{K_2}{K_1} = 1{,}41$$

$$\frac{K_3}{K_1} = 0{,}87$$

$$\frac{K_4}{K_1} = 1{,}66$$

Promotrimo uzorak A. Za vektor $K_1$ ću uzeti izračunati vektor

$$K_1 = 3{,}98\cdot 10^8\ \mathrm{cm}^{-1}$$

Treba izračunati omjere

$$\frac{3{,}42\cdot 10^8}{3{,}98\cdot 10^8} = 0{,}86$$

$$\frac{5{,}6\cdot 10^8}{3{,}98\cdot 10^8} = 1{,}41$$

$$\frac{6{,}61\cdot 10^8}{3{,}98\cdot 10^8} = 1{,}66$$

Podudaranje s teorijskim omjerima rešetke je izvrsno. Uzorak A je fcc Bravaisova rešetka.

Promotimo sada fcc recipročnu rešetku. Uzet ćemo vektore

$$\vec{K}_1 = \frac{4\pi}{a}\vec{e}_z$$

$$\vec{K}_2 = \frac{4\pi}{a}\cdot\frac{1}{2}\left(\vec{e}_y + \vec{e}_z\right)$$

$$\vec{K}_3 = \frac{4\pi}{a}\cdot\frac{1}{2}\left(\vec{e}_x + \vec{e}_y + \vec{e}_z\right)$$

$$\vec{K}_4 = \frac{4\pi}{a}\left(\vec{e}_x + \vec{e}_z\right)$$

Omjeri iznosa ovih vektora su:

$$\frac{K_2}{K_1} = 0{,}71$$

$$\frac{K_3}{K_1} = 1{,}22$$

$$\frac{K_4}{K_1} = 1{,}41$$

Promotrimo uzorak B. Za vektor $K_1$ uzet ću

$$K_1 = 3{,}31\cdot 10^8\ \mathrm{cm}^{-1}$$

Omjeri:

$$\frac{2{,}41\cdot 10^8}{3{,}31\cdot 10^8} = 0{,}73$$

$$\frac{4{,}09\cdot 10^8}{3{,}31\cdot 10^8} = 1{,}24$$

$$\frac{4{,}74\cdot 10^8}{3{,}31\cdot 10^8} = 1{,}43$$

Postoje male razlike, no to je posljedica rezolucije. Dakle, drugi uzorak je bcc Bravaisova rešetka.

Prema tome, treći uzorak je dijamantna struktura.

Uzorak A ... fcc

Uzorak B ... bcc

Uzorak C ... dijamantna struktura

(b)

Za uzorak A je

$$K_1 = \frac{4\pi}{a} = 3{,}98 \cdot 10^{8}\ \mathrm{cm}^{-1}$$

odavde

$$a = \frac{4\pi}{3{,}98 \cdot 10^{8}} = 3{,}16 \cdot 10^{8}\ \mathrm{cm}$$

Za uzorak B je

$$K_1 = 3{,}31 \cdot 10^{8}\ \mathrm{cm}^{-1}$$

$$a = \frac{4\pi}{3{,}31 \cdot 10^{8}} = 3{,}8 \cdot 10^{-8}\ \mathrm{cm}$$

Treba još izračunati konstantu rešetke za uzorak C. No, dijamantna rešetka je fcc s bazom, a recipročna je onda bcc, ali neki čvorovi imaju $S_{\vec{K}} = 0$. Prema tome, uzmemo li

$$K_1 = 5{,}6 \cdot 10^{8}\ \mathrm{cm}^{-1} = \frac{4\pi}{a}\sqrt{2}$$

$$a = \frac{4\pi}{5{,}6 \cdot 10^{8}} \cdot \sqrt{2} = 3{,}17 \cdot 10^{8}\ \mathrm{cm}$$

To je skoro isto kao i za uzorak A.