

# FIZIKA ČVRSTOG STANJA

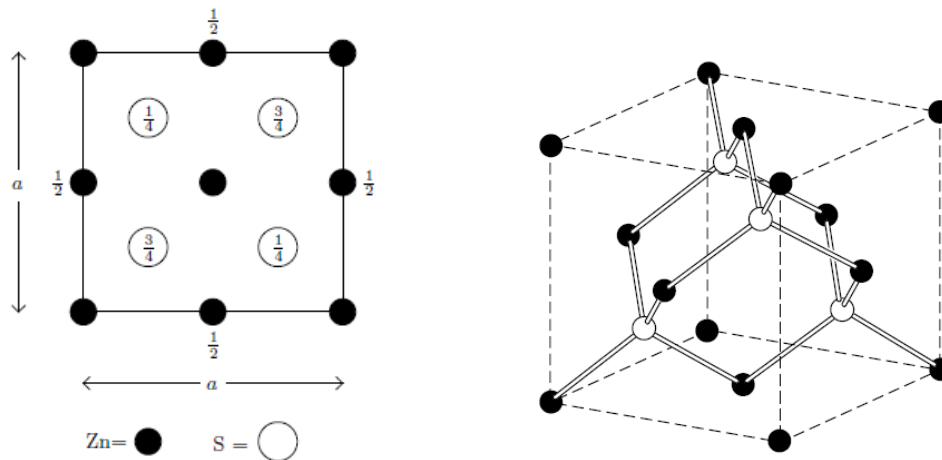
Prvi kolokvij 24.04.2020.

1. Na slici je prikazana sfaleritna (cink-blend) kristalna struktura ZnS iz tlocrta (lijeva slika) i 3D slika (desna slika). To je, ustvari, dijamanтна структура s dvije vrste atoma: Zn (crne kuglice) i S (bije 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 rešetke  $a = 0,541$  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 dijamanтна rešetka.

$\phi_A$	$30^\circ$	$35^\circ$	$50^\circ$	$60^\circ$
$\phi_B$	$21^\circ$	$29^\circ$	$36^\circ$	$42^\circ$
$\phi_C$	$30^\circ$	$50^\circ$	$60^\circ$	$74^\circ$

(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) Radije o fcc rešetki o bazam.

(b) U bazi re volave dva atoma:

Zn na položaju  $(0,0,0)$

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

(c) Najbliži susjedi:

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

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

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

$$d_{s-s} = a \sqrt{\left(\frac{3}{4} - \frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\right)^2 + \left(\frac{1}{4} - \frac{3}{4}\right)^2} = \sqrt{\frac{1}{2}}$$
$$= \frac{a}{\sqrt{2}} = 0,383 \text{ nm}$$

2.

Ovaj je zadatak sličan zadatku 5.3; poslušaj čine nekuni rezultata iz tog zadatka.

Braggov zakon

$$n\lambda = 2d \sin \frac{\phi}{2}$$

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

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

Uzorak A

$$30^\circ \dots \quad nK = 2 \cdot 6,61 \cdot 10^8 \cdot \sin \frac{30}{2} = 3,42 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

$$35^\circ \dots \quad nK = 3,98 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

$$50^\circ \dots \quad nK = 5,6 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

$$60^\circ \dots \quad nK = 6,61 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

Uzorak B

$$21^\circ \dots \quad nK = 2,41 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

$$29^\circ \dots \quad nK = 3,31 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

$$36^\circ \dots \quad nK = 4,09 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

$$42^\circ \dots \quad nK = 4,74 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

Uzorak C

$$30^\circ \dots \quad nK = 3,42 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

$$50^\circ \dots \quad nK = 5,6 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

$$60^\circ \dots \quad nK = 6,61 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

$$74^\circ \dots \quad nK = 7,97 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

Promotivimo najprije fcc Bivajnom rešetku, odnosno, bcc recipročnu rešetku. Budući da ne znamo konstantu rešetke  $a$ , možemo računati s omjerima recipročnih vektora.

Uzmimo vektore iz bcc recipročne rešetke

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

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

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

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

i omjere iznosi (iz zadatka 5.3)

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

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

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

Promotimo uzorak A. Za vektor  $K_1$  ču uvek računati vektor

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

Tada računati omjere

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

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

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

Podudavanje s teorijskim omjerima rešetke je izračun. Uzorak A je fcc Bravaisova rešetka.

Promotrimo sada fcc recipročnu rešetku. Uzet ćemo vektore

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

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

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

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

Omjeri mase suh vektora su:

$$\frac{\kappa_2}{\kappa_1} = 0,71$$

$$\frac{\kappa_3}{\kappa_1} = 1,22$$

$$\frac{\kappa_4}{\kappa_1} = 1,41$$

Promotrimo uzorak B. Za vektor  $\kappa_1$  uzet ću

$$\kappa_1 = 3,31 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

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 posledica reoluzivnosti. Dakle, drugi uzorak je bcc. Bravaisova rešetka.

Prema tome, prvi uzorak je dijamantna struktura.

Uzorak A ... fcc

Uzorak B ... bcc

Uzorak C ... dijamantna struktura

(b)

Za uzorak A je

$$\kappa_1 = \frac{4\pi}{a} = 3,98 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

odavde

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

Za uzorak B je

$$\kappa_1 = 3,31 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

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

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

$$\kappa_1 = 5,6 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1} = \frac{4\pi}{a} \sqrt{2}$$

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

To je skoro isto kao i za 47000 A.