D3 En BCC med gitterparameter a har primitiva vektorer:

$$\mathbb{a} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \quad , \mathbb{b} = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \quad , \mathbb{c} = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}).$$

Basvektorerna i det reciproka gittret ges av

$$\mathbb{A} = \frac{\mathbb{b} \times \mathbb{c}}{\mathbb{a} \cdot \mathbb{b} \times \mathbb{c}} \cdot 2\pi, \quad \mathbb{B} = \frac{\mathbb{c} \times \mathbb{a}}{\mathbb{a} \cdot \mathbb{b} \times \mathbb{c}} \cdot 2\pi, \quad \mathbb{C} = \frac{\mathbb{a} \times \mathbb{b}}{\mathbb{a} \cdot \mathbb{b} \times \mathbb{c}} \cdot 2\pi$$

$$\mathbb{b} \times \mathbb{c} = \frac{a^2}{4} \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^2}{4}(2\hat{x} + 2\hat{y} + 0\hat{z})$$

$$\mathbb{c} \times \mathbb{a} = \frac{a^2}{4} \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix} = \frac{a^2}{4}(0\hat{x} + 2\hat{y} + 2\hat{z})$$

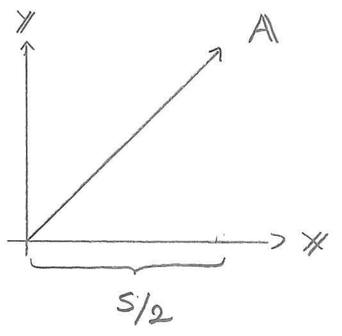
$$\mathbb{a} \times \mathbb{b} = \frac{a^2}{4} \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^2}{4}(2\hat{x} + 0\hat{y} + 2\hat{z})$$

$$\mathbb{a} \cdot \mathbb{b} \times \mathbb{c} = \frac{a}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} \cdot \frac{a^2}{4}\begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{a^3}{8}(2+2) = \frac{a^3}{2}$$

Vi får nu:

$$\mathbb{A} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y}) \quad , \mathbb{B} = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z}) \quad , \mathbb{C} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{z})$$

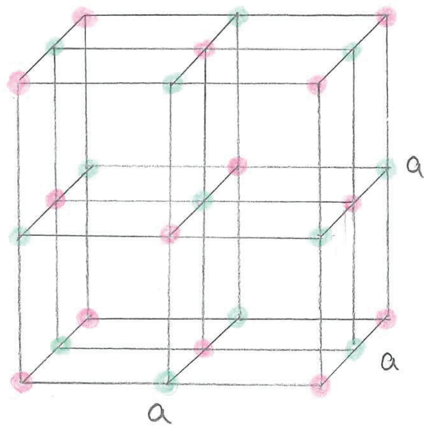
Ser att dessa vektorer bildar punkter på 3 närliggande sidor i en kub. Bestäm kantlängden s!



$$\frac{s}{2} = \frac{2\pi}{a}$$

$$\Rightarrow s = \frac{4\pi}{a}$$

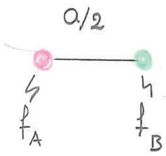
D8



Enhetscell för NaCl-struktur.

Gitter: FCC

Bas:



Vilka hkl är tillåtna för NaCl-strukturen?

Strukturfaktor: $S_{hkl} = \sum_i f_i e^{i \mathbf{r}_i \mathbf{G}_{hkl}}$

Vi studerar basen $\mathbf{r}_A = (0,0,0)$, $\mathbf{r}_B = (1/2, 0, 0) \cdot a$

$\mathbf{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l)$

$$\Rightarrow S_{hkl} = f_A e^{i \cdot (0,0,0)(2\pi h, 0, 0) \cdot \frac{a}{a}} + f_B e^{i (\frac{1}{2}, 0, 0)(2\pi h, 0, 0) \cdot \frac{a}{a}} = f_A + f_B e^{i \cdot \frac{h}{2} \cdot 2\pi}$$

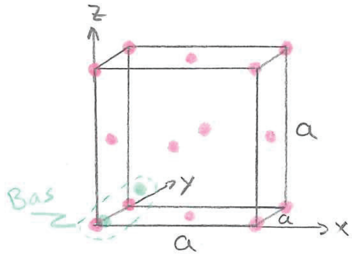
Om $f_A \neq f_B \Rightarrow S_{hkl} \neq 0 \ \forall \ h$

Om $f_A = f_B \Rightarrow S_{hkl} = 0$ för h udda $\left(e^{i\pi} = \cos\pi + i \sin\pi = -1 + 0i \right)$

Slutsats: Om atomspridningsfaktorerna f_i är lika stora och h är udda så kommer strukturfaktorn bli noll, och ingen reflexion kommer att uppstå. Skillnaden mellan resultaten beror uppenbarligen på att

$f_{K^+} \neq f_{Br^-}$ och $f_{K^+} \approx f_{Cl^-}$

D13 Si och GaAs har FCC-gitter.



- Si: $\mathbb{r}_1 = (0,0,0)a$, $\mathbb{r}_2 = (1/4, 1/4, 1/4)a$
- GaAs: $\mathbb{r}_1 = (0,0,0)a$, $\mathbb{r}_2 = (1/4, 1/4, 1/4)a$

De tillåtna reflexerna uppkommer då $S \neq 0$. Hitta de plan som gör att strukturfaktorn $S = 0$

$$S = \sum_j f_j e^{-i \Delta \mathbb{k} \cdot \mathbb{r}_j} = \sum_j f_j e^{-i \mathbb{G}_{hkl} \cdot \mathbb{r}} = 0$$

$$\mathbb{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h,k,l)$$

$$\Rightarrow f_1 e^{-i \frac{2\pi}{a}(h,k,l)(0,0,0)} + f_2 e^{-i \frac{2\pi}{a}(h,k,l)(1/4,1/4,1/4)a} = 0$$

Si

$$f_{Si}\left(1 + e^{-i\pi \cdot \frac{1}{2}(h+k+l)}\right) = 0$$

$$\Rightarrow 1 + \cos\frac{\pi}{2}(h+k+l) - i \sin\frac{\pi}{2}(h+k+l) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\pi}{2}(h+k+l) = \pi + n \cdot 2\pi$$

$$\Rightarrow \boxed{h+k+l = 2+4n} \qquad 111 \quad \cancel{200} \quad 220 \quad 311 \quad \ldots$$

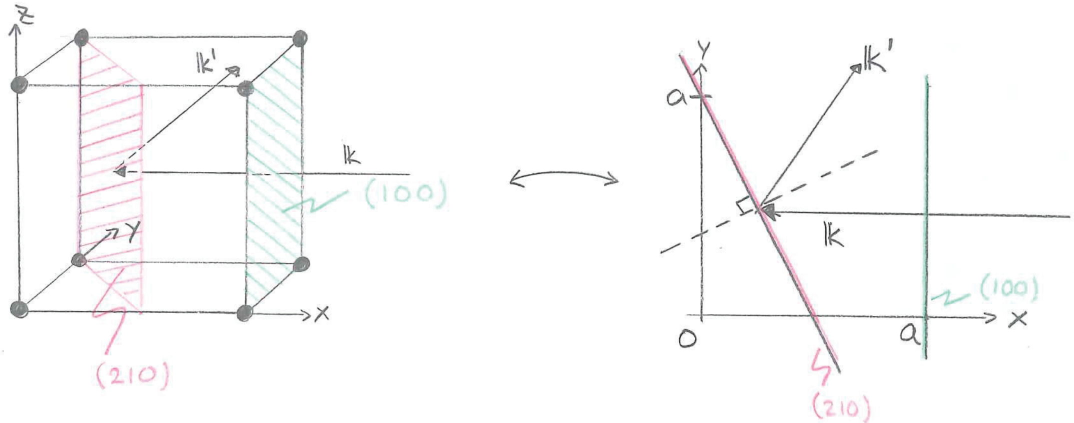
GaAs

$$f_{Ga} + f_{As} e^{-i \cdot \pi \cdot \frac{1}{2}(h+k+l)} = 0$$

Eftersom $f_{Ga} \neq f_{As}$ blir struktur faktorn alltid nollskild.

$\Rightarrow$ $\boxed{\text{Alla FCC-reflexer}}$ (h,k,l udda eller h,k,l jämna) erhålls.

D14



▸ Vid diffraktion är $\mathbb{k}' - \mathbb{k} = \mathbb{G}$, där $\mathbb{G}$ är (210)- planets reciproka gittervektor.

$$\mathbb{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l) \Rightarrow \mathbb{G}_{210} = \frac{2\pi}{a}(2, 1, 0)$$

$\mathbb{k} = (-k, 0, 0)$, ty infaller rakt mot planet (100)

▸ Vi kan nu beräkna $\mathbb{k}'$:

$$\mathbb{k}' = \mathbb{G}_{210} + \mathbb{k} = \left(\frac{4\pi}{a} - k, \frac{2\pi}{a}, 0\right)$$

▸ För att beräkna storleken på $|\mathbb{k}|$ används $|\mathbb{k}| = |\mathbb{k}'|$

$$|\mathbb{k}'| = \sqrt{\left(\frac{4\pi}{a} - k\right)^2 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2} = \sqrt{\frac{16\pi^2}{a^2} - \frac{8\pi k}{a} + k^2 + \frac{4\pi^2}{a^2}} = k' = k$$

$$\Rightarrow \cancel{k^2} = \frac{16\pi^2}{a^2} - \frac{8\pi k}{a} + \cancel{k^2} + \frac{4\pi^2}{a^2}$$

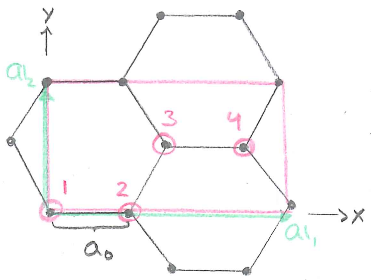
$$\Rightarrow \frac{8\pi k}{a} = \frac{20\pi^2}{a^2}$$

$$\Rightarrow k = \frac{20\pi}{8a} = \frac{5\pi}{2a}$$

$\therefore$ $|\mathbb{k}| = \frac{5\pi}{2a}$ ger diffraktion vid reflektion mot (210)

D24 Elektroner infallande vinkelrätt mot ett lager grafit (grafen)

a)



$$\begin{cases} a_1 = 3a_0\,\hat{x} \\ a_2 = \sqrt{3}\,a_0\,\hat{y} \end{cases}$$

Bas:
$$\begin{cases} r_1 = 0\,a_1 + 0\,a_2 \\ r_2 = \tfrac{1}{3}\,a_1 \\ r_3 = \tfrac{1}{2}\,a_1 + \tfrac{1}{2}\,a_2 \\ r_4 = \tfrac{5}{6}\,a_1 + \tfrac{1}{2}\,a_2 \end{cases}$$

b) Diffraktion

$$\left.\begin{aligned} b_1\cdot a_1 &= 2\pi \\ b_1\cdot a_2 &= 0 \end{aligned}\right\}\quad b_1 = \frac{2\pi}{3a_0}\,\hat{x}$$

$$\left.\begin{aligned} b_2\cdot a_2 &= 2\pi \\ b_2\cdot a_1 &= 0 \end{aligned}\right\}\quad b_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}\,a_0}\,\hat{y}$$

- Strukturfaktor för basen:

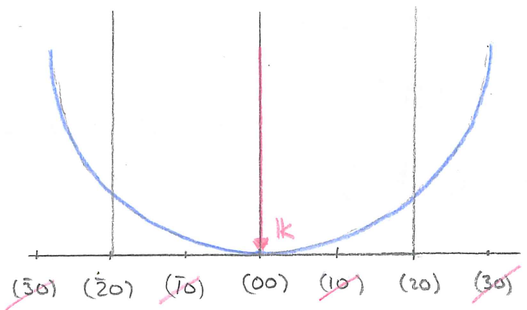
$$S_G = \sum_j f_j e^{-iG\cdot r_j} = \{\text{Bara kolatomer}\} = f\sum_{j=1}^{4} e^{-iG\cdot r_j}$$

Med $G = h b_1 + k b_2$

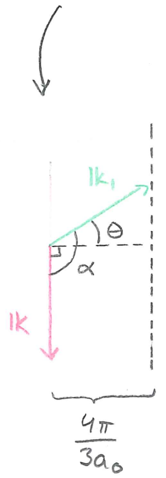
$$\Rightarrow S_{hk} = f\left(1 + e^{-i\frac{2\pi}{3}h} + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\left(\frac{5\pi}{3}h + \pi k\right)}\right) =$$

$$= f\left(1 + e^{-i\pi(h+k)}\right)\left(1 + e^{-i\frac{2\pi}{3}h}\right) \qquad \therefore\ h+k \text{ udda} \Rightarrow S_{hk} = 0$$

- Ewaldsfärkonstruktion. $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = 4{,}07\cdot 10^{10}\ m^{-1}$



Intilliggande stavar (närmaste) har avstånd $2\cdot|b_1| = \dfrac{4\pi}{3a_0}$



$$\cos\theta = \frac{2|b_1|}{k} = \frac{\frac{4\pi}{3a_0}}{4{,}07\cdot 10^{10}} = 43{,}5^\circ$$

$$\Rightarrow \alpha = \theta + 90^\circ = \underline{\underline{133{,}5^\circ}}$$