

## FIZIKA TRDNE SNOVI

Marko Petrič

marko.petric@guest.arnes.si

Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani

(Dated: 7. november 2007)

### I. STRUKTURNI FAKTOR

Definirajmo strukturni faktor kot

$$\begin{aligned} S_K &= \int_{r_0} \rho(\vec{r}) e^{i\vec{K}\vec{r}} dV \quad , \\ &= \sum_{j=1} f_j e^{-i\vec{K}\vec{r}_j} \quad , \end{aligned}$$

kjer je

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{j=1} \rho_j(\vec{r} - \vec{r}_j) \quad .$$

Razvijemo vektor  $\vec{K}$  po recipročni bazi in  $\vec{r}_j$  po vektorjih do atomov osnovne celice

$$\vec{K} = \sum_i m_i \vec{b}_i \quad \text{in} \quad \vec{r}_j = \sum_i \eta_i \vec{a}_i \quad .$$

Splošno lahko zapišemo produkt

$$\vec{K}\vec{r}_j = 2\pi (m_1\eta_1 + m_2\eta_2 + m_3\eta_3) \quad .$$

### II. FCC

Izračunajmo strukturni faktor za FCC mrežo. Bazni vektorji za FCC mrežo so:

$$(0, 0, 0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad .$$

Sedaj lahko zapišemo strukturni faktor

$$S_K = 1 + e^{-i\pi(m_1+m_2)} + e^{-i\pi(m_3+m_2)} + e^{-i\pi(m_1+m_3)} \quad .$$

Ugotovimo lahko da obstajajo štiri možnosti

1.  $m_1, m_2, m_3$  so vsi sodi, potem je  $S_K = 4$ ,
2.  $m_1, m_2, m_3$  so vsi lihi, potem je  $S_K = 4$ ,
3. en faktor sod dva liha, potem je  $S_K = 0$ ,
4. en faktor lih dva soda, potem je  $S_K = 0$ .

### III. DIAMANT

Iračunajmo strukturni faktor za diamant. Dimant je FCC mreža z bazo  $(0, 0, 0), \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$ . V primeru kadar imamo mrežo z bazo lahko zapišemo strukturni faktor kot

$$\begin{aligned} S_K &= S_{\text{mreža}} S_{\text{baza}} \quad , \\ &= \left[ 1 + e^{-i\pi(m_1+m_2)} + e^{-i\pi(m_3+m_2)} + e^{-i\pi(m_1+m_3)} \right] \left[ 1 + e^{-i\frac{\pi}{2}(m_1+m_2+m_3)} \right] \quad . \end{aligned}$$

Tukaj lahko opazimo tri možnosti

1.  $m_1 + m_2 + m_3 = 4n$  in so vsi sodi, potem je  $S_K = 8$ ,
2.  $m_1, m_2, m_3$  so vsi lihi, potem je  $S_K = 4(1 + i)$ ,
3.  $m_1 + m_2 + m_3 = 2(2n + 1)$  potem je  $S_K = 0$ .