

Løsningsforslag
72551 Strukturphysikk

Tirsdag 15. des. 1987

Oppgave 1

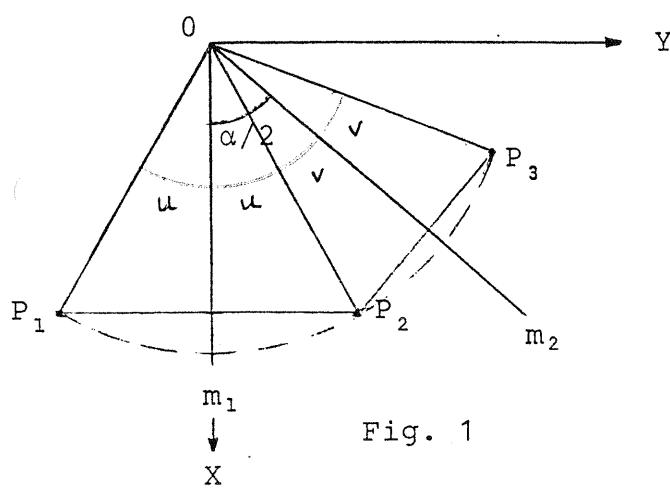


Fig. 1

(a) Transformasjon $P_1 \rightarrow P_2$
fra fig.

$$R_1$$

$$\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}$$

For transformasjonen $P_2 \rightarrow P_3$ f.eks.:

$$\text{Fra fig. : } u+v = \alpha/2 \Rightarrow 2u+2v = \alpha$$

$$x_2 = r\cos u ; y_2 = r\sin u$$

$$\begin{aligned} x_3 &= r\cos(2v+u) = r\cos(\alpha-u) = r\cos\alpha\cos u + r\sin\alpha\sin u \\ &= \underline{x_2 \cos\alpha + y_2 \sin\alpha} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y_3 &= r\sin(2v+u) = r\sin(\alpha-u) = r\sin\alpha\cos u - r\cos\alpha\sin u \\ &= \underline{x_2 \sin\alpha - y_2 \cos\alpha} \end{aligned}$$

For $P_2 \rightarrow P_3$:

$$R_2$$

$$\begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & -\cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix}$$

Transformasjonen $P_1 \rightarrow P_3$:

$$\begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix} = R_2 \cdot R_1 \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}$$

$$R_3 = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix}$$

R_3 tilsvarer rotasjon av P_1 en vinkel α om en akse $\parallel z$ -aksen.

b) Fra pkt a) innsees at de nevnte rotasjonene om hhv. A, B og C er ekvivalente med par av speilinger, slik: gjennom AOC og AOB, deretter AOB og BOC, deretter BOC og AOC. Speilingene kansellerer hverandre parvis \Rightarrow Silvesters teorem oppfylt.

For den sfæriske trekanten ABC gjelder:

$$\alpha/2 + \beta/2 + \gamma/2 > \pi \quad (1)$$

Krav til rotasjonsaksene:

$$\alpha = 2\pi/n_A, \beta = 2\pi/n_B, \gamma = 2\pi/n_C \quad (2)$$

der n_A , n_B og n_C er heltall.

Det gir innsatt i (1):

$$1/n_A + 1/n_B + 1/n_C > 1 \quad (3)$$

Prøving viser at bare følgende heltallskombinasjoner oppfyller (3):

22n, 233, 234 og 235

c) Bare disse aksetallighetene er i samsvar med translasjons-periodisiteten i et gitter:

$$\{n_A, n_B, n_C\} = 2, 3, 4, \text{ og } 6 \quad (4)$$

(Dette kan lett vises, men forlanges ikke gjort.) Krystallografisk "tillatte" treakse-kombinasjoner:

222, 223, 224, 226, 233 og 234

235 faller ut.

d) En romgruppe kan tenkes framkommet ved å la en tillatt kombinasjon av symmetrielementer gjenta seg periodisk i rommet ved de translasjonene Bravais-gitteret angir. Kombinasjonen av symmetrielementer og Bravais-gitteret må ha korresponderende symmetri og innta parallell orientering. Siden en romgruppe alltid kan genereres vha. tre eller færre generatorer $\{\tilde{C}_j\}$ kan vi skrive analytisk for den:

$$\{\tilde{C}_j\}\{\tilde{T}_m\} \quad j = 1, 2, 3 \quad (5)$$

en $\{\tilde{C}_j\}$ representerer alle mulige potenser av symmetrielementet C_j .

Dersom færre enn tre generatorer:

\Rightarrow en eller to $\{\tilde{C}_j\} \equiv \{1\}$ = identitetsoperatoren.

$$\tilde{T}_m = \{1 | \tilde{T}_m\} = m_1 \tilde{a} + m_2 \tilde{b} + m_3 \tilde{c} = \text{translasjonsoperator.}$$

$\{m_1, m_2, m_3\}$ = heltall, men kan også være forskjellige komb. av halvtall ved sentrerte gitre.

Symmorfe romgrupper: Hver C_j tilsvarer enten en rotasjonsakse (proper) eller en inversjonsakse (improper).

Ikke-symmorfe romgrupper: Minst en C_j tilsvarer et ikke-symmorft symmetrielement, dvs. en skrueakse eller et glideplan. For disse elementene gjelder: $\{C_j\} = \{\tilde{R}_j | T_j\}$ der T_j tilsv. translasjon(er) lik rasjonale fraksjoner av en eller flere identitetsperioder.

e) n representerer diagonalt glideplan

y-akse unik \Rightarrow glideplanet \perp y-aksen, dvs. det gir translasjonen $a/2 + c/2$.

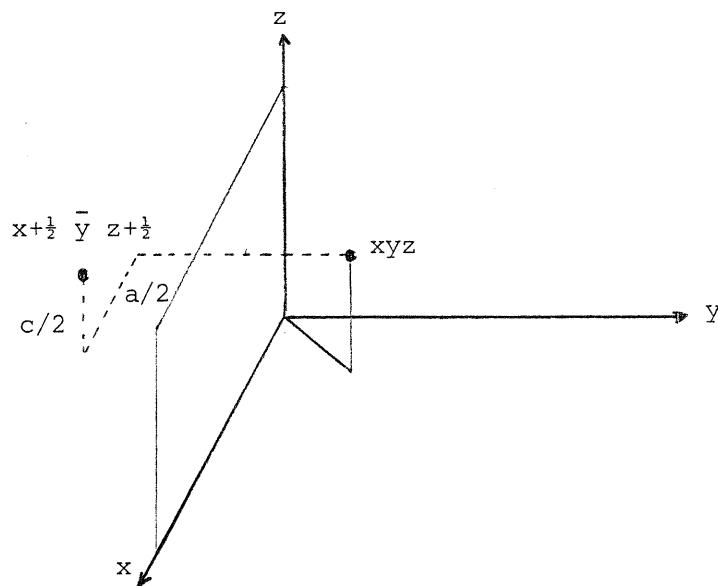


Fig. viser par av ekviv. posisjoner pga. glideplanet.

Strukturfaktor:

$$\begin{aligned}
 F_{hkl} = & \sum_{j=1}^{n/2} f_j [\exp(2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)) \\
 & + \exp(2\pi i(h(x_j + \frac{1}{2}) - ky_j + lz_j + \frac{1}{2}))] \quad (6)
 \end{aligned}$$

Utslokningsregel bare for k = 0

$$\begin{aligned}
 F_{h01} &= \sum_{j=1}^{n/2} f_j [\exp(2\pi i(hx_j + lz_j)) \\
 &\quad + \exp(2\pi i(hx_j + lz_j)) \cdot \exp(2\pi i(h/2 + 1/2))] \\
 F_{h01} &= [1 + (-1)^{h+1}] \sum_{j=1}^{n/2} f_j \cdot \exp(2\pi i(hx_j + lz_j)) \quad (7)
 \end{aligned}$$

↓

$$0 \text{ for } (h + 1) = 2n + 1$$

$$\begin{aligned}
 F_{h01} &= \\
 &2 \cdot \sum_{j=1}^{n/2} f_j \exp(2\pi i(hx_j + lz_j)) \text{ for } (h + 1) = 2n
 \end{aligned}$$

f) Avstanden mellom identiske svarte fisker gir translasjonsperioden horisontalt og vertikalt. Origo i cella legges der finnene av to svarte fisker berører hverandre (en svømmer opp, en ned). Cella inneholder fire svarte og fire hvite fisker. Utmåling av de to cellekantene antyder tetragonal (kvadratisk) celle, men 4-tallig aksesymmetri finnes ikke, derimot 2-tallig. Plassering av alle 2-tallige akser er enkel og gir en av de tre mulighetene p2mm, p2mg og p2gg. Cella har glideplan i 1/4 og 3/4 langs begge akser, altså:

Orthorombisk aksesystem; plangruppe p2gg

Oppgave 2.

a) Se kompendium, kap. 9.1.

b) $h_2(x) = \int h_1(x_1) h_1(x-x_1) dx_1 = h_1 \circ h_1$

c) Sannsynlighetsfordelingen for n'te-nærmeste nabo er

$$h_n = \underbrace{h_1 \times h_1 \times h_1 \cdots \cdots \times h_1}_{n \text{ ganger}}$$

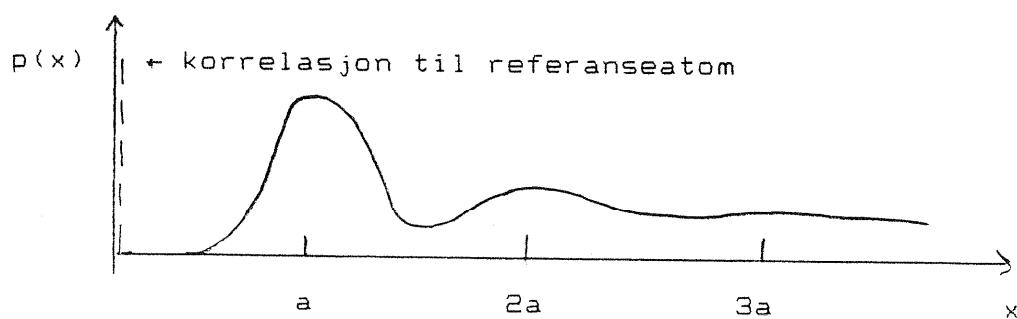
F.eks. for h_2 :

$$\int h_2(x) dx = \int dx \int h_1(x') h_1(x-x') dx' = \int h_1(y) dy \int h_1(x') dx' = 1$$

d) $\langle x \rangle = \int_0^\infty x h_2(x) dx = \int_0^\infty \int_0^\infty x h_1(x_1) h_1(x-x_1) dx_1 dx$

$$\langle x \rangle = \int_0^\infty \int_0^\infty (x_1 + y) h_1(x_1) h_1(y) dx_1 dy = a+a = 2a$$

e) Korrelasjon med seg selv og alle andre gitterpunkter. Summen gir parkorrelasjonsfunksjonen. Når x vokser må vi få en gradvis utsmøring av gitterposisjonene. Kvalitativt:



Intensitet er lik transformen av Pattersonfunksjonen;

$$\tilde{p} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{h}^n + \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{h}^{*n}$$

$$\tilde{p} = 1 + \tilde{h} \frac{1}{1-\tilde{h}} + \tilde{h}^* \frac{1}{1-\tilde{h}^*}$$

$$\tilde{p} = 1 + \frac{\tilde{h} - \tilde{h}^* \tilde{h} + \tilde{h}^* - \tilde{h}^* \tilde{h}}{1 - 2\operatorname{Re}\tilde{h} + |\tilde{h}|^2}$$

$$\tilde{p} = \frac{1 - |\tilde{h}|^2}{1 - 2\operatorname{Re}\tilde{h} + |\tilde{h}|^2}$$

dvs.

$$I = \tilde{p}$$

$$\tilde{h} = e^{iQa} g(Q) = e^{iQa} e^{-b^2 Q^2 / 4}$$

$$I = \frac{1 - e^{-b^2 Q^2 / 2}}{1 - 2\cos(Qa)e^{-b^2 Q^2 / 4} + e^{-b^2 Q^2 / 2}}$$

f) Betyr at $b \ll a$ og rekkeutvikling er mulig. Ubestemt når $Q \rightarrow 0$. (Egentlig $\delta(Q)$) Dessuten vil $I(Q) \rightarrow 1$ når $Q \rightarrow \infty$. Får utdøende oscillasjoner. Maksima inntrer (omtrent) når

$$1 - 2\cos(Qa)(1 - b^2 Q^2 / 4) + \dots + 1 - b^2 Q^2 / 2 + \dots = 0$$

$$1 - \cos Qa \approx 0$$

$$Qa \approx n2\pi$$

$$Q \approx n \frac{2\pi}{a}$$

dvs. i nærheten av de resiproke gitterpunktene.

