UNIVERSITETET I TRONDHEIM
NORGES TEKNISKE HØGSKOLE
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:
Navn: Johannes Bremer, Frode Mo
Tlf.: 534536, 3582, 3585

EKSAMEN I FAG 74551 STRUKTUR OG DIFFRAKSJON

Lørdag 10. desember 1988
Tid: kl 0900 - 1300

Hjelpemidler: Godkjent lommekalkulator tillatt
Rottmannn: Mathematische Formelsammlung

Oppgave 1.

a) Forklar kort hva de krystallografiske punktgruppene representerer.

b) Hvilke postulater må være oppfylt for at en mengde av elementer skal kunne kalles en gruppe?

Punktgruppen 2/m har elementene: e, 2, $\bar{1}$, m. Vis at denne samlingen av elementer oppfyller gruppepostulatene.

c) Vis analytisk at to orthogonale 2-tallige akser sammen genererer en tredje akse av samme tallighet, og orthogonal med de to første.

Studer så (analytisk) følgende aksekombinasjoner:

I) $2 \; 2_1$ II) $2_1 \; 2_1$

Her refererer første symbol seg til en akse || [100] og andre symbol til en akse || [010]. Vis resultatene i skisse når den genererte aksen i begge tilfelle skal være en 2-tallig rotasjonsakse.

d) Bruk resultatet fra c) til å lage to projeksjoner || [001] av romgruppen $P2_12_12$. Den ene skal vise plasseringen av symmetrielementene; den andre de generelle, ekvivalente posisjonene. (Legg origo i den 2-tallige rotasjonsaksen.)

Gi spesielt tallighet og koordinater for de generelle, ekvivalente posisjonene.

Direction [0 0 0]

$1(E) \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \bar{1}(i) \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$

Direction [1 0 0]

$2(C_2) \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad \bar{2} \equiv m(\sigma) \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

H $2(C_2) \quad \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad \bar{2} \equiv m\ (\sigma) \quad \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

$4(C_4) \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \bar{4}(S_4^3) \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$

$4^2(C_4^2) = 2(C_2) \qquad \bar{4}^2(S_4^2) = 2(C_2)$

$4^3(C_4^3) \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \bar{4}^3(S_4) \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$

Direction [0 1 0]

$2(C_2) \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad \bar{2} \equiv m(\sigma) \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

H $2(C_2) \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \qquad \bar{2} \equiv m(\sigma) \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

$4(C_4) \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad \bar{4}(S_4^3) \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

$4^2(C_4^2) = 2(C_2) \qquad \bar{4}^2(S_4^2) = 2(C_2)$

$4^3(C_4^3) \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad \bar{4}^3(S_4) \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

Direction [0 0 1]

$2(C_2) \quad \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \bar{2} \equiv m(\sigma) \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$

H $3(C_3) \quad \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \bar{3}(S_6^5) \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$

H $3^2(C_3^2) \quad \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \bar{3}^5(S_6) \quad \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$

H $\bar{3}^2(S_6^4) = 3^2(C_3^2)$
H $\bar{3}^3(S_6^3) = \bar{1}(i)$
H $\bar{3}^4(S_6^2) = 3(C_3)$

Oppgave 2.

I denne oppgaven skal røntgen-diffraksjon på sylinderformede enheter ("elektronstaver") undersøkes. Følgende relasjoner oppgis:

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ix\cos\beta}\, d\beta$$

$$\int J_0(x)x\,dx = xJ_1(x)$$

a) Gi en kort beskrivelse (utledning kreves ikke) av fouriertransformen til en punktrekke som har translasjonssymmetri.

b) Bruk resultatet fra a) og konstruér det resiproke gitteret for et heksagonalt plangitter. Finn retning og størrelse på $\vec{a}^*$ og $\vec{b}^*$. (Gittervektorer i det resiproke rommet.)

c) Tettpakkede, parallelle og sylinderformede staver skal brukes som en modell for lange molekyler, fibriller o.l. Stavene har radius R, og den felles stavlengden L oppfyller kravet L >> R. Hver stav har en homogen elektrontetthet n. Fig. 1 viser et snitt normalt sylinderaksene. Beregn diffraktert intensitet I(hk0).

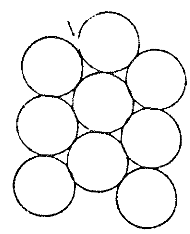

Fig. 1

d) Hvordan forandrer intensiteten seg når stavlengden L avtar og går mot null?

e) Nematisk orientering av flytende krystaller kan oppfattes som en samling av uordnede, men parallelle, sylindriske staver; se Fig. 2. Utled korrelasjonsfunksjonen i x,y-planet.

Finn et uttrykk for intensiteten når det antas at den asimutale vinkelen mellom to vilkårlige sylindre er tilfeldig fordelt over intervallet $[0,2\pi]$.

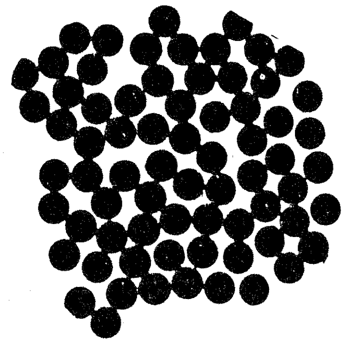

Fig. 2