مسائل حالت جامد　　سری دوم　　آخرین مهلت تحویل : ۸۷/۷/۳۰

۱- با استفاده از نظریه کوانتومی پراکندگی نشان دهید دامنهٔ پراکندگی که عامل ساختار نامیده می‌شود عبارتست از :

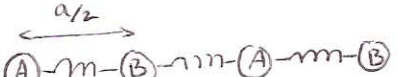
$$S_G = \int dV\, n(\vec{r})\, \exp(-i\vec{G}\cdot\vec{r})$$

۲- عامل ساختار را برای الماس پیدا کرده و با یافتن صفرهای عامل ساختار نشان دهید در بازتابهای مجاز یا تمام شاخصها زوجند و رابطهٔ $h+k+l=4n$ که $n\in Z$ ارضا می‌شود و یا تمام شاخصها فردند.

۳- چگالی تعداد الکترونها در اتم هیدروژن در حالت پایه به صورت : $n(r)=\frac{1}{\pi a_0^3}e^{-\frac{2r}{a_0}}$ است که a_0 شعاع بوهر است. نشان دهید form factor به صورت زیر است :

$$f_G = \frac{16}{(4+G^2a_0^2)^2}$$

۴- زنجیره یک بعدی اتمهای A و B را در نظر بگیرید.



نشان دهید که شدت بازتاب پراشیده برای nهای فرد با $|f_A-f_B|^2$ و برای nهای زوج با $|f_A+f_B|^2$ متناسب است. اگر $f_A=f_B$ باشد چه اتفاقی می‌افتد؟

۵- کبالت دو فرم دارد : α-Co با ساختار hcp و $a=2.51\text{Å}$ و β-Co با ساختار fcc و $a_{cubic}=3.55\text{Å}$. فرض کنید در ساختار hcp نسبت $\frac{c}{a}$ ایده‌آل است. پنج قلهٔ اول پراش اشعهٔ X را حساب نمائید. برای تعیین مکان قله‌ها بر حسب 2θ از رابطهٔ $\Delta k=\frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta$ استفاده کنید. (λ طول موج اشعهٔ X است.)

۶- ساختار A_nC_{60} مقالهٔ Fleming (در سری مسائل قبلی) را در نظر بگیرید. با توجه به مقاله فرض کنید آزمایش پراش اشعهٔ X با طول موج $\lambda=0.9\text{Å}$ روی C_{60} آلاییده با Rb انجام داده‌اید و می‌خواهید استوکیومتری ترکیب را بدانید. برای انجام کار باید مکان پنج قله پراش اول را برای سه ساختار مشاهده شده محاسبه کنید. انجام کار را انجام دهید. (سه ساختار با آلایندگی 3، 4 و 6 در جدول 2 مقاله آمده‌است.)

در مقالهٔ فوق با فرض اینکه توزیع بار فولرین(C_{60}) توسط یک سطح کروی با شعاع 3.5Å داده می‌شود form factor را حساب کنید. نشان دهید form factor (200) ضعیف‌تر از (111) است.