

1. שרשרת דו אטומית

נתונה שרשרת אטומים ABAB...AB בה הקשר A - B הינו באורך $\frac{a}{2}$. נתונים גורמי המבנה f_A, f_B .

עבור האטומים A ו-B. קרן של קרינת X פוגעת במאונך לשרשרת האטומים.

א. הראו כי התנאי להתאבכות בונה הוא $a \cos \theta = n\lambda$ כאשר θ היא הזווית בין הקרן הנשברת והשרשרת.

ב. הראו שעוצמת הקרן הנשברת מתכונתית ל- $|f_a - f_b|^2$ עבור n אי זוגי ול- $|f_a + f_b|^2$ עבור n זוגי.

ג. מה קורה כאשר $f_a = f_b$? מדוע עוצמת ההחזרה מתאפסת בחלק מהמקרים?

2. form factor

בהינתן גביש קובי פשוט, $a=3A$ המכיל אטומים בעלי צפיפות אלקטרונים גאוסניית:

$$C(r) = \frac{Z}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-r^2/\sigma^2), \sigma = 1 \text{ \AA}$$

חשב את היחסים בין גובה ההחזרות של קרינת X מהמישורים (100) ו (200) ו (111).

3. structure factor

השתמש בוקטורי התא הקובנציונלי ומצא את גורם הצורה עבור שריגי ה FCC ויהלום. מהם המישורים הדלוקים והכבויים עבורם?

4. אופרטור טרנסלציה משמר תנע שריגי

בתרגיל הקודם ראינו כי $\vec{u}(\vec{r}) \propto \sum (\vec{a}_k + \vec{a}_{-k}^+) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$, לכן כדי להוכיח כי האופרטור

המשמר יש להוכיח כי: $e^{i\vec{k}\vec{R}_0} \vec{a}_k^+ e^{-i\vec{k}\vec{R}_0} = e^{i\vec{k}\vec{R}_0} \vec{a}_k^+$. השתמשו בעובדה כי הערכים העצמים של K

מקיימים $\vec{K}|\{n_k\}\rangle = (\sum \vec{k}n_k)|\{n_k\}\rangle$ כדי להוכיח כי האופרטור אכן מתאים (הפעילו אותו על מצב

כללי של המערכת)

5. Lindemann

היעזרו בקירוב דבאי והעריכו מהי הטמפרטורה המשווערת שבה תחל הנחושת לעבור היתוך. הניחו כי בטמפרטורה זו מגיע שורש הממוצע הזמני על ריבוע סטיית האטומים ממקומם בשווי משקל לכדי חמישית מקבוע הסריג.