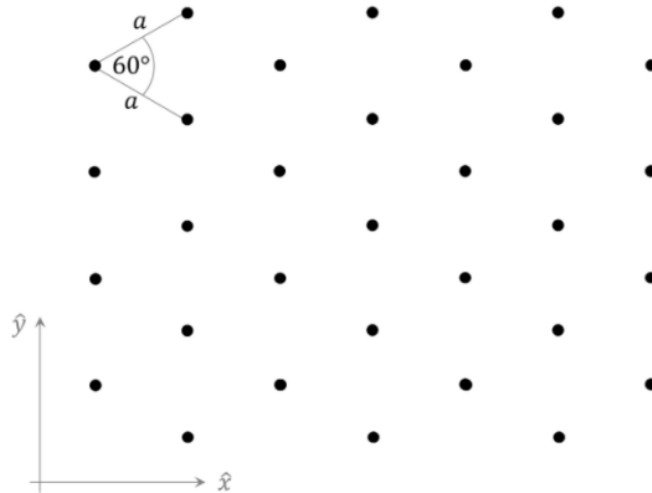


תרגיל בית מספר 9

שאלה 1: סריג הקסגונולי

נתון קטע מסריג (מישורי) משושה (הקסגונולי):



א. מצאו ורשמו שני זוגות שונים של וקטורים פרימיטיביים לסריג זה.
 וקטורי סריג פרימיטיבי לדוגמא:

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} + \frac{1}{2} \hat{y} \right) \\ \vec{a}_2 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} - \frac{1}{2} \hat{y} \right) \end{cases} \quad \begin{cases} \vec{a}'_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} + \frac{1}{2} \hat{y} \right) \\ \vec{a}'_2 = a \hat{y} \end{cases}$$

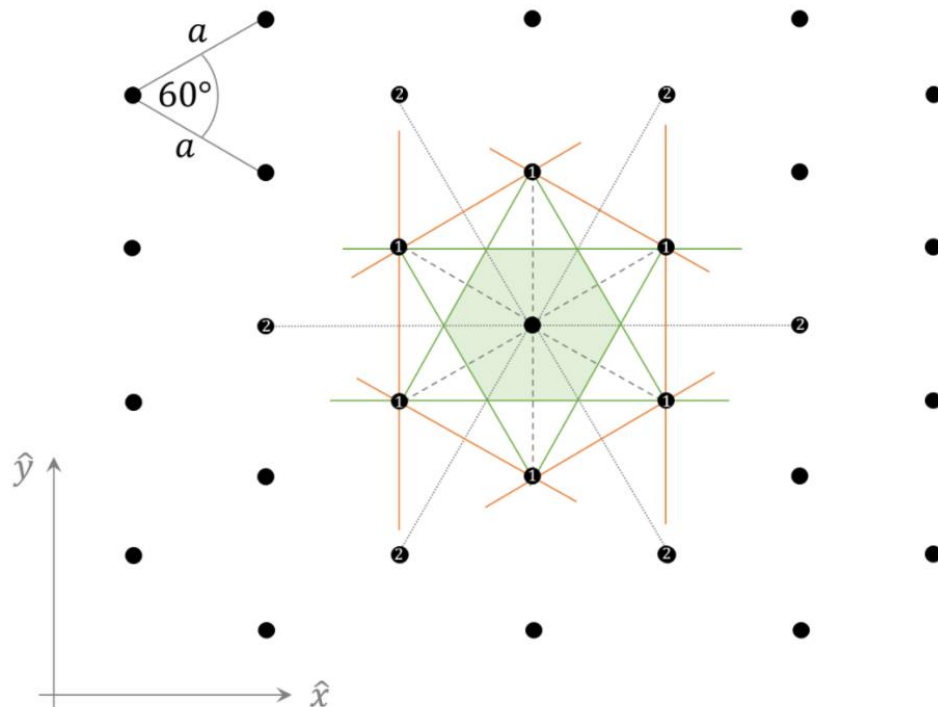
ב. חשבו את שטח תה היחידה הפרימיטיבי.

$$S = |\hat{z} \cdot (\vec{a}'_1 \times \vec{a}'_2)| = \left| \hat{z} \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \cdot \hat{z} \right) \right| = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2$$

ג. ציירו את תא ויגנר-זייץ של הסריג

תא ויגנר-זייץ של הסריג:

חיברנו קווים (אפור מקווקו) אל הנקודות הקרובות ביותר (מסומנות ב-1).
 מתחנו קווים (קווים ירוקים) מאונכים לקווים במרכזם של הקווים הללו.
 קיבלנו מצולע סגור. נבדוק כי האנכים האמצעיים של קבוצת הנקודות הקרובה ביותר הבאה (מסומנת ב-2) לא מקטינה את המצולע הסגור.
 חזרנו על הפעולות (קווים אפורים מנוקדים וקווים כתומים) עבור הנקודות השניות הכי קרובות (מסומנות ב-2).
 הקווים הכתומים לא מקטנים את המצולע הסגור שקיבלנו ולכן זהו תא ויגנר-זייץ והוא מסומן בירוק. זהו משושה משוכלל עם צלע באורך $\sqrt{3}$.



שאלה 2:

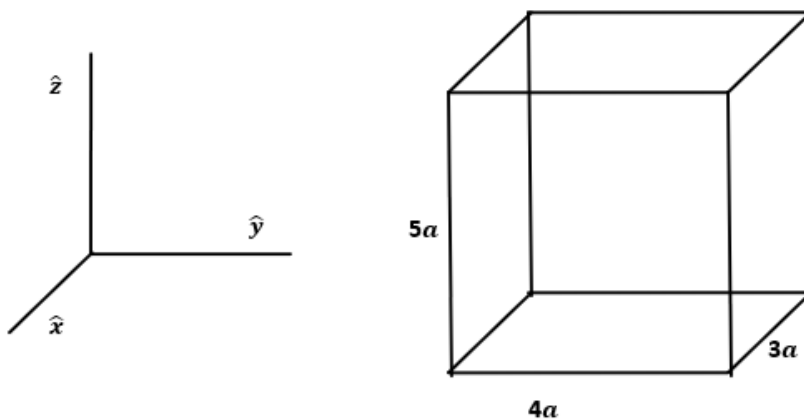
נתון סריג אורתורומבי עם צלעות $3a, 4a, 5a$.

- השתמשו בסט הוקטורים הראשוניים $\vec{a}_1 = 3a\hat{x}$, $\vec{a}_2 = 4a\hat{y}$, $\vec{a}_3 = 5a\hat{z}$ וציירו תא יחידה של הסריג.
- מהו נפח תא היחידה?
- מצאו וקטורים ראשוניים של הסריג הופכי ומצאו את נפח תא היחידה של הסריג ההופכי. הראו כי מכפלת הנפחים של תא היחידה של הסריג ההופכי ותא היחידה של הסריג הישר מקיימת את התוצאה שראיתם בהרצאה ובתרגולים.
- נתמקד כעת בוקטור הסריג ההופכי

$$\vec{G} = \vec{b}_1 + \vec{b}_3$$

מהו אינדקס מילר המתאים לוקטור זה? ציירו מישור המתואר על ידי אינדקס מילר זה, ומצאו את המרחק בין מישורים סמוכים במשפחת המישורים השייכת לאינדקס מילר זה.

א.



ב. את נפח תא

היחידה אפשר לחשב לפי

$$V = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| = 60a^3$$

ג. וקטורים ראשוניים של הסריג ההופכי ניתן לקבל מתוך

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{\pi}{30a^3} 20a^2 \hat{x} = \frac{2\pi}{3a} \hat{x}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = \frac{\pi}{30a^3} 15a^2 \hat{y} = \frac{\pi}{2a} \hat{y}$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = \frac{\pi}{30a^3} 12a^2 \hat{z} = \frac{2\pi}{5a} \hat{z}$$

נפח תא היחידה של הסריג ההופכי הוא

$$V^* = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)| = \frac{2}{15} \pi^3$$

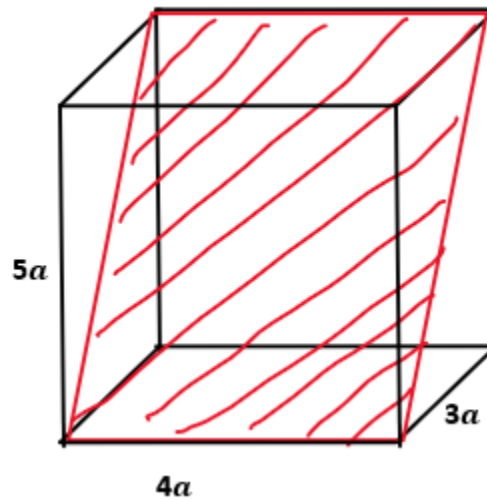
ומתקיים

$$VV^* = 8\pi^3 = (2\pi)^3$$

ד. אינדקס מילר המתאים לוקטור

$$\vec{G} = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$$

הוא (1,0,1).



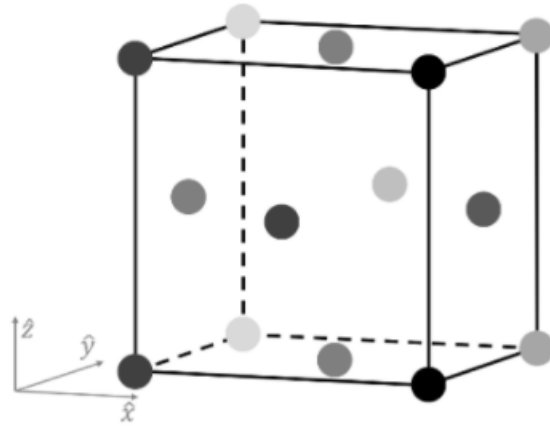
המרחק בין מישורים סמוכים נתון על ידי

$$\frac{2\pi}{|\vec{G}_{min}|} = \frac{2\pi}{\sqrt{|\vec{b}_1|^2 + |\vec{b}_3|^2}} = \frac{2\pi}{\sqrt{\frac{136}{225}}\pi} \frac{a}{\pi} = 2a \sqrt{\frac{225}{136}}$$

כאשר כאן G_{min} הוא וקטור הסריג ההופכי הנתון בשאלה.

שאלה 3: סריג FCC

נתונה יחידה חוזרת של סריג הנקרא "קובי ממורכז פאה" (Face Centered Cubic- FCC)



אורך צלע הקוביה הוא a . הנקודה הנוספת נמצאת במרכז כל פאה.

א. כמה נקודות סריג ישנן בתוך היחידה המצוירת?

ביחידה חוזרת המצוירת יש 4 נקודות: 8 שמניות הנקודה בכל פינה (סך הכל נקודה) ועוד חצי נקודה בכל פאה (סך הכל 3).

ב. מצאו שלשה אחת וקטורים פרימיטיביים לסריג זה.

וקטורי הסריג הפרימיטיביים המקובלים ביותר הם הסימטריים:

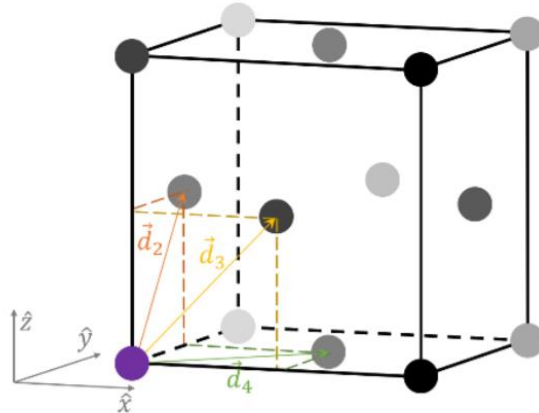
$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x}) \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$$

ג. חשבו את נפח תא היחידה הפרימיטיבי לסריג הנתון.

$$V = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| = \frac{a^3}{8} \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{8} |0 - 1 \cdot (0 - 1) + 1 \cdot (1 - 0)| = \frac{a^3}{4}$$

ד. תארו סריג זה כסריג קובי פשוט עם בסיס (רשמו את הוקטורים הפרימיטיביים ואת וקטורי הבסיס). כמה נקודות יש בבסיס?

נבחר את הבסיס ביחס לנקודה השמאלית הקדמית ואת שלוש הנקודות בפאות הסמוכות לה:

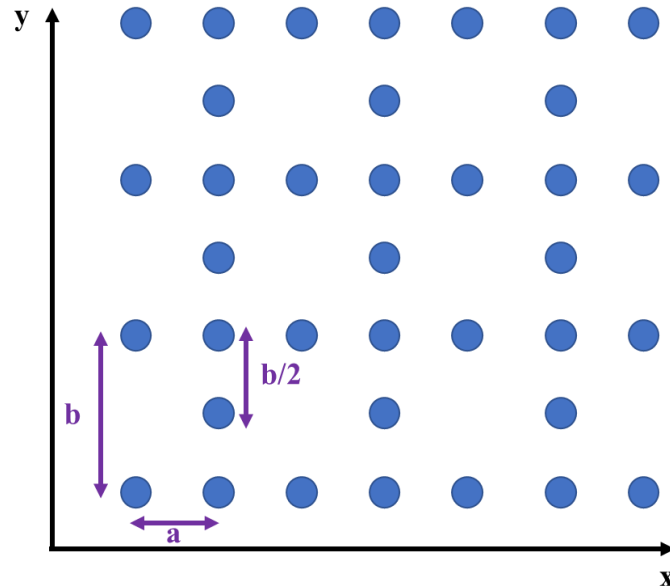


כך שהבסיס:

$$\vec{d}_1 = 0 \quad \vec{d}_2 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \quad \vec{d}_3 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x}) \quad \vec{d}_4 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$$

שאלה 4:

נתון גביש הבא



- א. האם זה סריג Bravais? כתבו מהם וקטורי שריג הראשונים ווקטורי בסיס, דאגו לבחור מספר מינמאלי של וקטורי בסיס (אם קיימים).
- ב. ציירו את תא היחידה. כמה נקודות שריג מוכלים בתוך התא שציירתם.
- ג. ציירו את תא Wigner-Seitz כמה נקודות שריג מוכלים בתוך התא?
- ד. על גביי סריג הישיר ציירו משפחות קווי שריג הבאות (31) , (12) , $(\bar{4}1)$.

שאלה 4: פתרון

א,ב. השריג אינו שריג ברווה. אחת מהבחירות אפשריות של וקטורי השריג

$$a_1 = 2a\hat{x}$$

$$a_2 = b\hat{y}$$

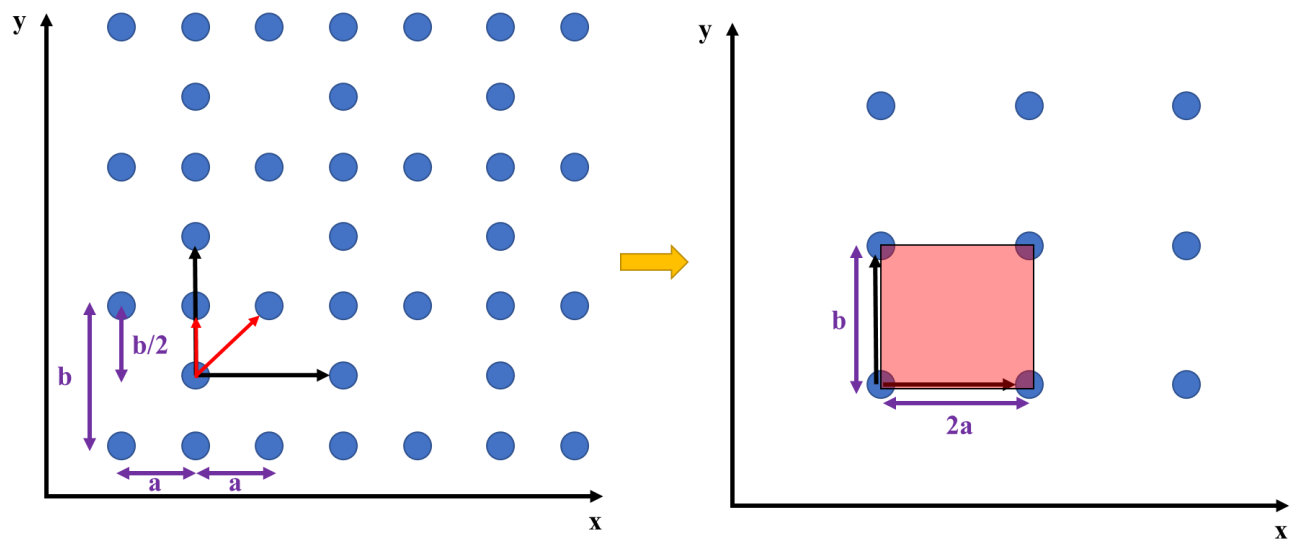
וקטורי בסיס

$$d_1 = 0\hat{x} + 0\hat{y}$$

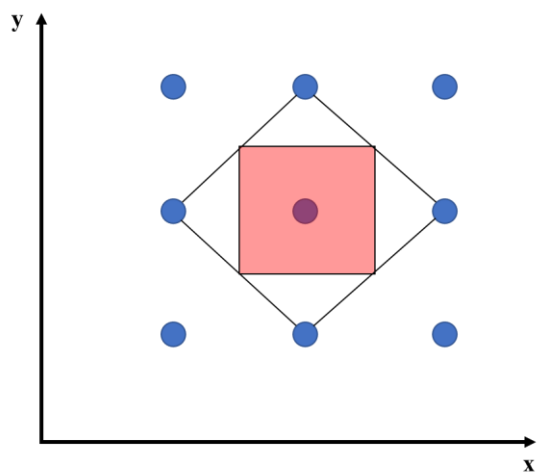
$$d_2 = a\hat{x} + b/2\hat{y}$$

$$d_3 = b/2\hat{y}$$

תא יחידה מצויר באדום והינו תא ראשוני (ישנה נקודת שריג אחת בלבד)



ג. תא Wigner Seitz מוגדר עבור שריג בלבד ולא עבור גביש ומכיל נקודת שריג אחת בהגדרה



ד. משפחות קווי השריג נקבעות לפי וקטורי השריג הישיר שבחרתם

