מבוא למצב מוצק תשפ"ג – תרגול 6
הסריג ההופכי

ספרות מומלצת:

- Ashcroft, Mermin: ch. 5
- Simon: ch. 13

1 הסריג ההופכי Reciprocal lattice

הסריג ההופכי של סריג ברווה מוגדר בתור אוסף הווקטורים $\mathbf{G}$ המקיימים $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$ לכל וקטור $\mathbf{R}$ בסריג.
הסריג ההופכי הוא סריג ברווה (במרחב $\mathbf{k}$); הסריג ההופכי לסריג ההופכי הוא הסריג הישיר (direct lattice) שממנו התחלנו. בין וקטורי הסריג הישיר $\mathbf{a}_i$ לבין וקטורי הסריג ההופכי $\mathbf{b}_i$ מתקיים הקשר

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

1.1 וקטורי הסריג ההופכי ב-3D

אם $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ הם וקטורי הסריג הישיר, וקטורי הסריג ההופכי נתונים על ידי

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{v_p}$$
$$\mathbf{b}_2 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{v_p}$$
$$\mathbf{b}_3 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{v_p}$$

כאשר $v_p = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)|$ נפח תא יחידה פרימיטיבי בסריג הישיר.

1.2 וקטורי הסריג ההופכי ב-2D

אם $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ הם וקטורי הסריג הישיר,

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \hat{z}}{v_p}$$
$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\hat{z} \times \mathbf{a}_1}{v_p}$$

כאן $v_p = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2| = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \hat{z})|$ הוא שטח תא היחידה הפרימיטיבי ו-$\hat{z}$ וקטור יחידה בכיוון ניצב למישור הסריג.

1.3 סריגים הופכיים לסריגים קוביים

ראיתם בכיתה כי:

- הסריג ההופכי לסריג SC עם צלע a הוא סריג SC עם צלע $\frac{2\pi}{a}$.
- הסריג ההופכי לסריג FCC עם צלע a הוא סריג BCC עם צלע $\frac{4\pi}{a}$.

תרגיל

מצאו את הסריג ההופכי לסריג BCC עם צלע a.

פתרון

הסריג ההופכי הוא סריג FCC עם צלע $\frac{4\pi}{a}$. נציג שתי דרכי פתרון אפשריות.

<u>דרך א'</u>: חישוב ישיר. את נפח התא הפרימיטיבי v_p אפשר לחשב בקלות מתוך נפח תא היחידה הקונבנציונלי הקובי a^3 ומכך שתא כזה מכיל 2 נקודות סריג BCC, ולכן $v_p = \frac{1}{2}a^3$. מהצבת וקטורי סריג BCC בנוסחה

לווקטורי הסריג ההופכי, נקבל

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\frac{1}{2}a^3} = ... = \frac{2\pi}{a}\left(\hat{y}+\hat{z}\right)$$

וכן הלאה, כך שמתקבלים וקטורי הסריג המתאימים לסריג FCC עם צלע $\frac{4\pi}{a}$.

דרך ב': נזכור שהסריג ההופכי לסריג ההופכי הוא הסריג הישיר, ולכן מספיק למצוא סריג שעבורו סריג BCC הוא הסריג ההופכי. אבל מההרצאה, סריג BCC עם צלע a הוא ההופכי של סריג FCC עם צלע $\frac{4\pi}{a}$, שכן

$$\frac{4\pi}{(4\pi/a)} = a$$

וזה נותן את התשובה הרצויה.

2 אזורי ברילואן Brillouin zones

אזור ברילואן הראשון הוא תא ויגנר-זייץ של הסריג ההופכי. נזכיר שלצורך מציאת תא ויגנר-זייץ אנחנו מותחים קטעים מהראשית אל כל שאר הנקודות, ודרך האמצע של כל קטע מעבירים ישר (ב-2D) או מישור (ב-3D) שמאונך לקטע. באופן כללי, אזור ברילואן ה-n מורכב מהנקודות במרחב שניתן להגיע מהן אל הראשית באמצעות חציית $n-1$ ישרים/מישורים כנ"ל, אבל לא פחות מכך.

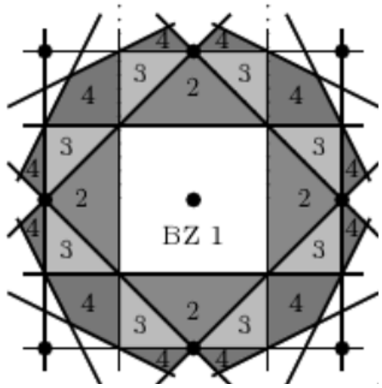
תרגיל

ציירו את אזורי ברילואן הראשון, השני והשלישי עבור סריג הופכי ריבועי (2D).

פתרון

ראו איור.

הערה אזור ברילואן ה-n הוא אוסף הנקודות במרחב שעבורן יש בדיוק $n-1$ נקודות סריג שקרובות אליהן יותר מאשר נקודת הייחוס. לחלוקת הסריג ההופכי לאזורי ברילואן יש חשיבות במסגרת התיאוריה של פונונים ואלקטרונים בגביש.



איור 1: אזורי ברילואן 1-4 של סריג ריבועי דו-מימדי.

3 מישורים בסריג (והקשר לסריג ההופכי)

ניתן לחלק את הסריג (הישיר) למשפחת מישורים (ב-2D: ישרים) מקבילים שמכילה את כל נקודות הסריג. המרחק בין מישורים סמוכים קבוע, וכל מישור מכיל כשלעצמו אינסוף נקודות סריג.

לכל משפחת מישורים בסריג הישיר מתאימה קבוצת וקטורי סריג הופכי שכולם ניצבים למישורים במשפחה, ולהפך. אם d הוא המרחק בין מישורים סמוכים במשפחה אז $|\mathbf{G}_{\text{min}}| = \frac{2\pi}{d}$, כאשר $\mathbf{G}_{\text{min}}$ הוא הווקטור הקצר ביותר בקבוצת הווקטורים הניצבים.

אינדקסי מילר (h,k,l) מהווים דרך לסמן את משפחת המישורים, כאשר

$$\mathbf{G}_{\text{min}} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$$

שימו לב שההגדרה של אינדקסי מילר תלויה בבחירת וקטורי הסריג $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ (משום שהם קובעים את $\mathbf{b}_i$).

תרגיל

נתון סריג קובי פשוט עם צלע a. מצאו את אינדקסי מילר של משפחת המישורים המקבילים למישור yz, ואת המרחק בין מישורים סמוכים.

פתרון

הסריג ההופכי של סריג SC עם צלע a הוא סריג SC צלע $\frac{2\pi}{a}$. אחד מהווקטורים הפרימיטיביים של הסריג ההופכי הוא $b_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$, והוא ניצב למשפחת המישורים בה אנחנו דנים. אין וקטור סריג הופכי קצר יותר שמקביל לו,

ולכן המרחק בין המישורים הוא

$$d = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}_{\text{min}}|} = \frac{2\pi}{|\mathbf{b}_1|} = a$$

את $\mathbf{G}_{\text{min}}$ ניתן לכתוב בצורה $\mathbf{G} = 1 \cdot \mathbf{b}_1 + 0 \cdot \mathbf{b}_2 + 0 \cdot \mathbf{b}_3$ ולכן אינדקסי מילר של משפחת מישורים זו הם (100).

תזכורת אם במרחב של הסריג הישיר מישור מהמשפחה חותך את הצירים שמוגדרים ע"י וקטורי הסריג בנקודות

$$x_1\mathbf{a}_1, x_2\mathbf{a}_2, x_3\mathbf{a}_3$$

אז אינדקסי מילר מקיימים

$$\frac{1}{x_1} : \frac{1}{x_2} : \frac{1}{x_3} = h : k : l$$

תרגיל

נתון סריג דו-מימדי מלבני עם וקטורי סריג $\mathbf{a}_1 = a_1\hat{x}, \mathbf{a}_2 = a_2\hat{y}$, כאשר $a_1 < a_2$. מהו הסריג ההופכי? ציירו את משפחת הישרים המתוארים על ידי אינדקסי מילר $(1, 2)$.

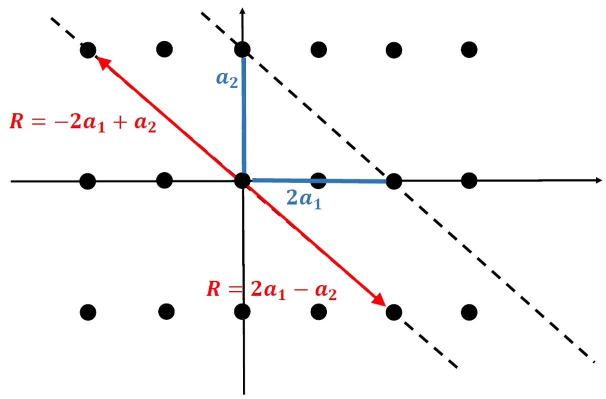
פתרון

נמצא את וקטורי הסריג ההופכי בהתאם לנוסחה, כאשר נפח תא פרימיטיבי בסריג הישיר הוא $v_p = a_1 \cdot a_2$:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_2 \times \hat{z}}{v_p} = 2\pi\frac{a_2\hat{y} \times \hat{z}}{a_1 \cdot a_2} = \frac{2\pi}{a_1}\hat{x}$$
$$\mathbf{b}_2 = 2\pi\frac{\hat{z} \times \mathbf{a}_1}{v_p} = 2\pi\frac{a_1\hat{z} \times \hat{x}}{a_1 \cdot a_2} = \frac{2\pi}{a_2}\hat{y}$$

קיבלנו סריג מלבני עם צלעות $b_1 = \frac{2\pi}{a_1} > \frac{2\pi}{a_2} = b_2$.

כדי לשרטט את משפחת המישורים עם אינדקסי מילר $(1, 2)$, ניתן להשתמש בקשר בין אינדקסי מילר לבין



איור 2: מציאת משפחת הישרים $(1,2)$ בסריג מלבני דו-מימדי. בכחול: לפי נקודות החיתוך עם הצירים שמגדירים וקטורי הסריג; באדום: לפי וקטורי סריג המקבילים למשפחת הישרים.

נקודות החיתוך עם וקטורי הסריג:

$$\frac{1}{x_1} : \frac{1}{x_2} = h : k = 1 : 2 \implies 2x_2 = x_1$$

כלומר מצאנו את היחס בין נקודות החיתוך של הישר עם הצירים המוגדרים על ידי וקטורי הסריג.

<u>דרך נוספת</u>: נמצא וקטורי סריג ישיר $\mathbf{R} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$ המקבילים למשפחת הישרים המבוקשת. וקטורים אלו יהיו, על פי הגדרת אינדקסי מילר, ניצבים לווקטור הסריג ההופכי $\mathbf{G} = 1 \cdot \mathbf{b}_1 + 2 \cdot \mathbf{b}_2$. מהדרישה $\mathbf{R} \cdot \mathbf{G} = 0$ ומהקשר $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ נקבל את התנאי

$$(m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2) \cdot (\mathbf{b}_1 + 2\mathbf{b}_2) = 0 \implies m + 2n = 0$$

קיבלנו שווקטורי סריג ישיר מהצורה $-2n\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$ מקבילים למשפחת הישרים המבוקשת. זה אומר שהראשית $\mathbf{R} = 0$ תיכלל באותו ישר יחד עם הנקודה $2\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$. מכאן ניתן להסיק כיצד ייראה הישר במשפחה שעליו נמצאת הראשית, ואז כיצד ייראו כל יתר הישרים.

הערה נסמן ב-σ את הצפיפות המשטחית של נקודות סריג בכל מישור במשפחת המישורים. אם d הוא המרחק בין מישורים סמוכים במשפחה אז $n = \sigma/d$ היא הצפיפות הנפחית של נקודות הסריג, וכמובן $n = 1/v_p$ לא תלויה במשפחת המישורים שעליה אנחנו מסתכלים. הצפיפות המשטחית $\sigma = nd$ המקסימלית תתקבל עבור d מקסימלי.

תרגיל

עבור סריגי BCC ו-FCC עם צלע a של התא הקובי, מצאו משפחת מישורים עם צפיפות משטחית מקסימלית של נקודות סריג. ציינו את המשפחה באמצעות אינדקסי מילר ביחס לווקטורי סריג SC.

פתרון

מהקשר $|\mathbf{G}_{\text{min}}| = \frac{2\pi}{d}$ נסיק כי מציאת משפחה עם צפיפות משטחית מקסימלית שקולה למציאת וקטור סריג הופכי באורך מינימלי.

- ההופכי לסריג BCC הוא סריג FCC עם צלע $\frac{4\pi}{a}$. בסריג זה המרחק הקצר ביותר בין נקודות סריג מיוצג, למשל, על ידי הווקטור $\frac{1}{2}\left(\frac{4\pi}{a}\hat{x} + \frac{4\pi}{a}\hat{y}\right)$. נכתוב וקטור סריג זה במונחי וקטורים פרימיטיביים של סריג SC עם צלע $\frac{2\pi}{a}$:

$$\mathbf{G} = \frac{2\pi}{a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{y} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$$

כלומר אינדקסי מילר יהיו (110).

- ההופכי לסריג FCC הוא סריג BCC עם צלע $\frac{4\pi}{a}$. בסריג זה המרחק הקצר ביותר בין נקודות סריג מיוצג, למשל, על ידי הווקטור $\frac{1}{2}\left(\frac{4\pi}{a}\hat{x} + \frac{4\pi}{a}\hat{y} + \frac{4\pi}{a}\hat{z}\right)$. נכתוב וקטור סריג זה במונחי וקטורים פרימיטיביים של סריג SC עם צלע $\frac{2\pi}{a}$:

$$\mathbf{G} = \frac{2\pi}{a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{y} + \frac{2\pi}{a}\hat{z} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3$$

כלומר אינדקסי מילר יהיו (111).