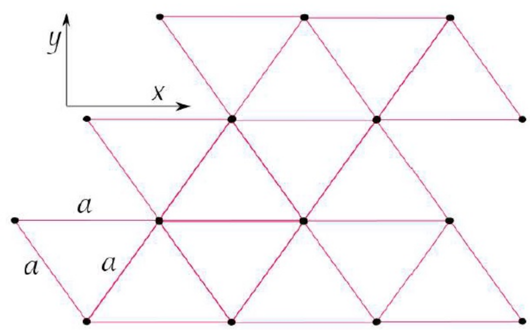
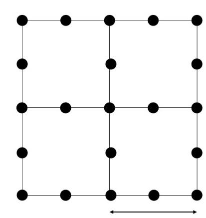
מבוא למצב מוצק תשפ"ג: תרגיל בית 5

1. נתון גביש דו-מימדי משולש, המורכב ממשולשים שווי-צלעות עם צלע a.

נסמן את אחד מהווקטורים הפרימיטיביים בסריג בתור $\mathbf{a}_1 = a\hat{x}$. הגדירו את שאר הווקטורים הפרימיטיביים. מהי צורתו של התא הפרימיטיבי שמוגדר על ידי הווקטורים הפרימיטיביים הנ"ל? מהו שטחו? מהי צורתו של תא ויגנר-זייץ עבור סריג זה?



2. נתון סריג דו-מימדי כמתואר באיור. האם זהו סריג ברווה? אם כן, מהם הווקטורים הפרימיטיביים שיוצרים אותו? אם לא, מהם הווקטורים הפרימיטיביים ומהם וקטורי הבסיס? ציירו את התא הפרימיטיבי שנוצר מהווקטורים הפרימיטיביים שהגדרתם עבור סריג זה. כמה אטומים בתא זה? ציירו את תא ויגנר-זייץ עבור סריג זה.



3. עבור סריג FCC (תלת-מימדי) עם צלע a, מצאו את מספר השכנים הקרובים מסדר שני ומסדר שלישי, ואת המרחק אליהם.

4. <u>יחס אריזה</u>: יחס אריזה הוא מדד לצפיפות הנקודות בסריג. נדמיין שבכל הנקודות בסריג אנחנו מציבים כדורים ברדיוס זהה – מהו הרדיוס המקסימלי של כדורים שניתן למקם כך בסריג? אם המרחק בין שכנים קרובים ביותר הוא r_0, אז הרדיוס המקסימלי של כדור כזה יהיה $R_{\max} = \frac{1}{2} r_0$. בסריג ברווה,

יחס האריזה הינו גודל חסר מימדים, המוגדר בתור היחס בין נפח הכדור הנ"ל לבין הנפח של תא יחידה פרימיטיבי. לדוגמה, בסריג קובי פשוט (SC) עם צלע a, נפח תא היחידה הוא a^3 והמרחק בין שכנים קרובים ביותר הוא a. נחשב את יחס האריזה:

$$\eta = \frac{\frac{4\pi}{3} {R_{\text{max}}}^3}{a^3} = \frac{\frac{4\pi}{3} \left(\frac{a}{2}\right)^3}{a^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52$$

חשבו את יחס האריזה עבור סריגי BCC ו-FCC. מי מהם "ארוז" בצורה יעילה יותר?

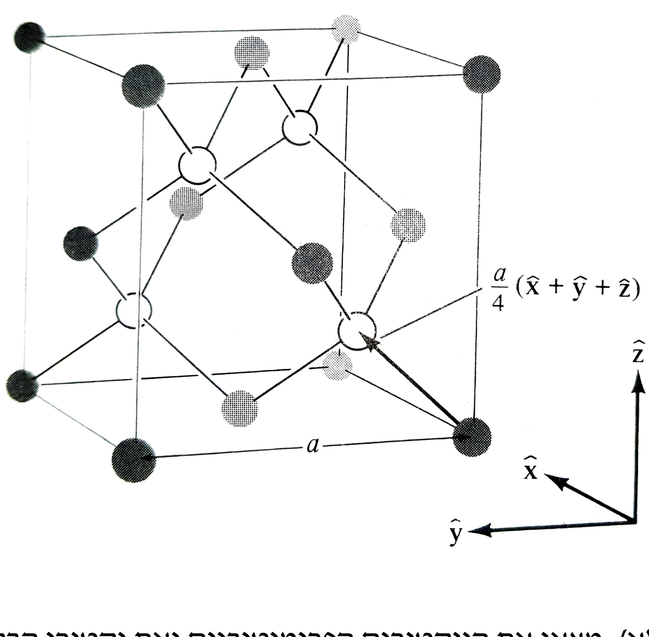
5. עבור כל אחד מן הסריגים התלת-מימדיים המתוארים להלן, ציינו האם מדובר בסריג ברווה. אם כן, מהם הווקטורים הפרימיטיביים? אם לא, הציגו אותו כסריג ברווה עם בסיס, וציינו את הווקטורים הפרימיטיביים ואת וקטורי הבסיס.

(א) סריג קובי פשוט (SC) בעל צלע a אשר נוספו לו 2 נקודות: נקודה במרכז הפאה התחתונה ונקודה במרכז הפאה העליונה.

(ב) סריג קובי פשוט (SC) בעל צלע a אשר נוספו לו 4 נקודות: נקודה אחת במרכז של כל פאה צדדית.

(ג) סריג קובי פשוט (SC) בעל צלע a אשר נוספו לו 12 נקודות: נקודה אחת במרכז כל מקצוע (הקטע המחבר שכנים קרובים) של הקוביה.

6. המבנה הגבישי של יהלום ניתן לתיאור על ידי שני סריגי FCC עם קבוע סריג זהה a, כאשר אחד מוזז ביחס לשני בווקטור $\mathbf{r} = \frac{a}{4}\left(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}\right)$ (ראו איור; לקוח מתוך Ashcroft&Mermin).



(א) מצאו את הווקטורים הפרימיטיביים ואת וקטורי הבסיס עבור התיאור של מבנה היהלום כ:

i. סריג FCC עם בסיס.

ii. סריג SC עם בסיס.

(ב) מצאו כמה שכנים קרובים יש לכל אטום, מה המיקומים שלהם ומה המרחק אליהם.

(ג) מצאו את יחס האריזה של יהלום. לצורך כך השתמשו בהגדרה המוכללת של יחס האריזה עבור סריג ברווה עם בסיס,

$$\eta = \frac{m \cdot \frac{4\pi}{3} {R_{\max}}^3}{v_p}$$

כאשר v_p הוא נפח התא הפרימיטיבי של סריג ברווה, ו-m הוא מספר הווקטורים בבסיס.