מבוא למצב מוצק תשפ"ג – תרגול 5
המבנה הגבישי: סריג ברווה

ספרות מומלצת:

- Ashcroft, Mermin: ch. 4
- Simon: ch. 12

1 סריג ברווה Bravais lattice

סריג ברווה הוא קבוצה אינסופית ובדידה של נקודות במרחב שמהווה ייצוג מתמטי מופשט עבור המבנה המחזורי של גביש. מכל נקודה שנמצאת בקבוצה הזו, המיקומים (מרחק וכיוון) של שאר הנקודות נראים זהים.

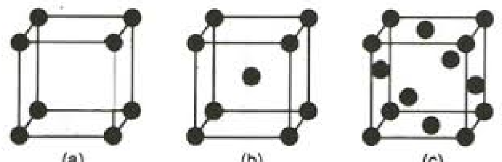
בשלושה מימדים, סריג ברווה מכיל את כל הנקודות מהצורה $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, כאשר n_1, n_2, n_3 מספרים שלמים ו-$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ הם שלושה וקטורים שאינם באותו מישור. וקטורים אלו נקראים **וקטורי הסריג**, והבחירה שלהם עבור סריג מסוים היא לא יחידה. אחת האפשרויות לבחירת וקטורי הסריג נקראת **וקטורים פרמיטיביים** (אזהרה: המינוח הזה לא אחיד בין הספרים): בוחרים את הווקטור הקצר ביותר המחבר בין נקודות, אז את הקצר ביותר שלא מקביל לו, ולבסוף את הקצר ביותר שלא באותו מישור כמו השניים הראשונים.

2 סריגי ברווה ב-3D: משפחת הסריגים הקוביים

2.1 סריג קובי פשוט (Simple cubic)

קוביה תלת-מימדית עם צלע a (איור 1(a)). בחירה טריוויאלית של וקטורי סריג תהיה

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{x},\ \ \mathbf{a}_2 = a\hat{y},\ \ \mathbf{a}_3 = a\hat{z}$$



איור 1: משפחת הסריגים הקוביים

2.2 סריג BCC (Body-centered cubic)

לוקחים סריג קובי פשוט עם צלע a ומוסיפים נקודה במרכז של כל קוביה (איור 1(b)). וקטורי סריג אפשריים:

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = a\hat{x} \\ \mathbf{a}_2 = a\hat{y} \\ \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}) \end{cases}$$

אפשר לחלופין לבחור סט יותר סימטרי:

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}-\hat{x}) \\ \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{z}+\hat{x}-\hat{y}) \\ \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z}) \end{cases}$$

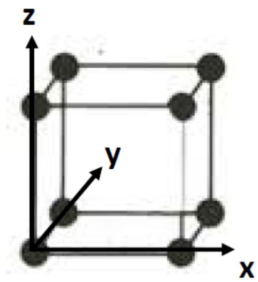
2.3 סריג FCC (Face-centered cubic)

לוקחים סריג קובי פשוט עם צלע a ומוסיפים נקודה במרכז של כל פאה (איור 1(c)). בחירה סימטרית של וקטורי סריג תהיה

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}) \\ \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}) \\ \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z}) \end{cases}$$

3 מספר קואורדינציה Coordination number

מספר הקואורדינציה של סריג הוא מספר השכנים הקרובים ביותר שיש לנקודה בסריג.



איור 2 : סריג קובי פשוט. לנקודה בראשית שכנים קרובים בנקודות $a\hat{x}, a\hat{y}, a\hat{z}$, ומסימטריית הסריג גם בנקודות $-a\hat{x}, -a\hat{y}, -a\hat{z}$.

תרגיל

מצאו את מספר הקואורדינציה של שלושת הסריגים הקוביים, ואת המרחק אל השכן הקרוב ביותר.

פתרון

סריג קובי פשוט נוכל לספור את מספר השכנים הקרובים בשתי שיטות :

- נסתכל על נקודה בראשית (איור 2). ניתן לראות כי השכנים הקרובים ביותר שלה נמצאים בכיוונים $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ ממנה, אך ברור מסימטריית הסריג כי יש גם שכנים בכיוונים $-\hat{x}, -\hat{y}, -\hat{z}$ באותו מרחק, ולכן בסך הכל ישנם 6 שכנים. המרחק אליהם הוא צלע הקוביה a.
- נקודה בראשית נמצאת בין 8 קוביות. בתוך כל קוביה כזו יש לה 3 שכנים קרובים ביותר, אך כל שכן כזה נספר 4 פעמים (כי הוא משותף ל-4 קוביות מתוך ה-8), ולכן בסך הכל $6 = 8 \cdot 3 \cdot \frac{1}{4}$.

סריג BCC נסתכל על נקודה במרכז הקוביה. ברור כי השכנים הקרובים הם הנקודות בפינות הקוביה, ויש 8 כאלו. כמו כן ברור כי המרחק אל כל נקודה מחוץ לקוביה גדול יותר ולכן היא לא שכן קרוב. בסך הכל מספר הקואורדינציה הוא 8, והמרחק לשכנים הקרובים ביותר הוא $\frac{\sqrt{3}}{2}a = \left|\frac{a}{2}\left(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}\right)\right|$.

סריג FCC לנקודה בראשית יש 3 שכנים קרובים ביותר בתוך קוביה אחת מתוך 8, במיקומים

$$\frac{a}{2}\left(\hat{x}+\hat{y}\right), \frac{a}{2}\left(\hat{z}+\hat{y}\right), \frac{a}{2}\left(\hat{x}+\hat{z}\right)$$

כל נקודה כזו נחלקת בין שתי קוביות, ולכן בסה"כ מספר הקואורדינציה הוא $12 = 3 \cdot 8 \cdot \frac{1}{2}$, והמרחק אליהן הוא $\frac{a}{\sqrt{2}} = \left|\frac{a}{2}\left(\hat{x}+\hat{y}\right)\right|$.

4 תא יחידה בסריג

4.1 תא יחידה פרימיטיבי Primitive unit cell

תא יחידה פרימיטיבי מוגדר להיות נפח במרחב שאם נסיט אותו לפי כל וקטורי הסריג $\mathbf{R}$ הוא ימלא את כל המרחב, בלי חורים ובלי חפיפות.

תא פרימיטיבי כזה יכיל בדיוק נקודת סריג אחת (אם יש נקודות על השפה של תא פרימיטיבי, צריך לספור אותן לפי החלוקה שלהן בין תאים שכנים), והבחירה שלו אינה יחידה. דרך אחת ליצור תא פרימיטיבי היא פשוט מתוך המקבילון שנוצר משלושת וקטורי הסריג שהגדרנו. נפח התא יהיה, אם כן,

$$v_p = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)|$$

והוא יהיה זהה לכל תא פרימיטיבי שנבחר. בפרט, אם n היא צפיפות הנקודות בסריג, אז מכיוון ש-v_p הוא בדיוק הנפח שמכיל נקודה אחת, מתקיים הקשר $v_p = 1/n$.

תרגיל

חשבו את נפח התא הפרימיטיבי עבור סריג SC ועבור סריג FCC.

פתרון

מובן שבסריג קובי פשוט $v_p = a^3$. נוודא כי בתא כזה אכן מוכלת נקודה אחת בלבד: יש לנו 8 נקודות בפינות, אך כל אחת מהן נחלקת בין 8 תאים סמוכים – סה"כ נקודה אחת.

עבור סריג FCC, פשוט נכפיל את הוקטורים הפרימיטיביים ונקבל

$$v_p = \frac{a^3}{8}\left|(1,1,0)\cdot[(0,1,1)\times(1,0,1)]\right| = \frac{a^3}{4}$$

4.2 תא יחידה קונבנציונלי Conventional unit cell

לעתים תא היחידה הפרימיטיבי לא מתאפיין בכל הסימטריות של הסריג. לדוגמה, תא היחידה הפרימיטיבי שהגדרנו עבור סריג FCC הוא מקבילון שלא משקף את הסימטריה הקובית של הסריג. פתרון אחד לסוגיה זו הוא הגדרת **תא יחידה קונבנציונלי**: זהו תא יחידה שמכיל יותר מנקודת סריג אחת, והוא נבחר כך שהוא שומר על הסימטריה של הסריג. אפשר למלא את המרחב בהעתקים של התא הזה ללא חפיפות או חורים, אך לא באמצעות הסטה לפי כל וקטורי הסריג אלא רק לפי תת-קבוצה שלהם.

תרגיל

נבחר את תא היחידה בגביש FCC להיות התא הקובי, בנפח $v = a^3$. כמה נקודות סריג יהיו בתא זה?

פתרון – דרך א'

נספור כמה נקודות נמצאות בתוך קוביה כזו: 8 על הפינות, כאשר כל אחת נחלקת בין 8 תאים סמוכים; 6 על הפאות, כשכל אחת נחלקת ל-2 תאים. בסך הכל: $4 = \frac{6}{2} + \frac{8}{8}$.

פתרון – דרך ב'

אם ניזכר שנפח התא הפרימיטיבי של סריג FCC הוא $\frac{a^3}{4}$, ושנפח כזה מכיל על פי הגדרה נקודת סריג אחת, נסיק כי תא בנפח a^3 מכיל 4 נקודות סריג.

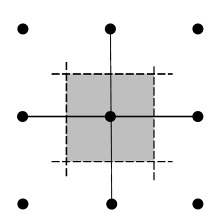
4.3 תא ויגנר-זייץ Wigner-Seitz unit cell

דרך נוספת להתמודדות עם סוגיית הסימטריה היא בחירת תא יחידה פרימיטיבי שמשמר את הסימטריה של הסריג. **תא ויגנר-זייץ** הוא תא פרימיטיבי שבמרכזו נקודת סריג כלשהי, והוא מורכב מכל הנקודות במרחב (לא נקודות סריג) שהנקודה במרכז היא נקודת הסריג הקרובה אליהן ביותר.

כיצד בונים תא ויגנר-זייץ?

- נסתכל על נקודת סריג אחת (נניח בראשית).
- נמתח קטעים ממנה אל כל נקודות הסריג האחרות.
- נמתח אנך אינסופי (ב-3D: מישור אינסופי שמאונך לקטע) מהאמצע של כל קטע כזה.
- הצורה הסגורה הקטנה ביותר שהאנכים (ב-3D: המישורים) הנ"ל יתחמו היא תא היחידה של ויגנר-זייץ.

הערה בפועל, בשלב השני לא נצטרך באמת למתוח קטעים אל כל נקודות הסריג האחרות, אלא אל נקודות סריג קרובות בלבד (אבל אולי לא רק הקרובות ביותר); עבור נקודות סריג רחוקות מספיק יהיה ברור שהאנך (ב-3D: המישור) שחוצה את הקטע יימצא כולו מחוץ לתא ויגנר-זייץ שכבר נתחם על ידי אנכים (ב-3D: מישורים) קרובים יותר.



איור 3: דוגמה לבניית תא ויגנר-זייץ עבור סריג דו-מימדי ריבועי.

5 גביש כסריג עם בסיס Lattice with a basis

לעתים אנחנו נתקלים במבנה של גביש שלא ניתן לתאר באופן ישיר כסריג ברווה – לדוגמה, בגלל צורה גיאומטרית שלא מתאימה לסוג סריג כזה, או משום שהגביש אינו מונואטומי. כדי לתאר מבנה מחזורי כללי, ניתן לשייך לכל

נקודת סריג ברווה קבוצה של נקודות שחוזרת על עצמה, ובאמצעות **בסיס** לציין את המיקומים של כל הנקודות בקבוצה ביחס לנקודת הסריג. בסך הכל מתקבל מבנה המתואר על ידי סט וקטורי סריג + סט וקטורי בסיס.

תרגיל

הגיעו לייצוג של סריג BCC כסריג SC עם בסיס.

פתרון

וקטורי הסריג יהיו וקטורי הסריג הקובי הפשוט, $\mathbf{a}_1 = a\hat{x}, \mathbf{a}_2 = a\hat{y}, \mathbf{a}_3 = a\hat{z}$. בתא יחידה שמוגדר על ידי הווקטורים האלה יש שני אטומים, ולכן נזדקק לשני וקטורי בסיס : אחד ממוקם על נקודת הסריג הקובי הפשוט, והשני במרכז הקוביה. וקטורי הבסיס יהיו, אם כן,

$$\mathbf{b}_1 = 0, \mathbf{b}_2 = \frac{a}{2}\left(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}\right)$$

תרגיל

סריג "חלת דבש" (honeycomb) דו-מימדי **אינו** סריג ברווה. נקודות שכנות בסריג לא רואות סביבות זהות, אלא סביבה מסובבת ב-180 מעלות. נסתכל על סריג חלת דבש עם מרחק a בין נקודות סמוכות. הגיעו לייצוג של סריג זה כסריג ברווה עם בסיס.

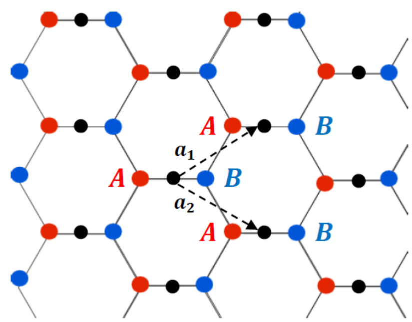
פתרון

אם נקבץ זוגות של נקודות סמוכות ונייצג אותן על ידי נקודה אחת שממוקמת באמצע ביניהן, נגיע לסריג משולש שהוא אכן סריג ברווה (איור 4). וקטורי הסריג יהיו

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{3}{2}a\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y} \\ \mathbf{a}_2 = \frac{3}{2}a\hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y} \end{cases}$$

וקטורי הבסיס יהיו

$$\begin{cases} \mathbf{b}_1 = \frac{a}{2}\hat{x} \\ \mathbf{b}_2 = -\frac{a}{2}\hat{x} \end{cases}$$



איור 4: סריג חלת דבש כסריג ברווה עם בסיס: המבנה A-B (נקודה אדומה ונקודה כחולה) חוזר על עצמו בתבנית של סריג ברווה משולש, שבו לכל נקודת סריג ניתן לשייך שני וקטורים המתארים את מיקומי הנקודות A ו-B ביחס אליה.