מבוא למצב מוצק תשפ"ג: תרגיל בית 6

1. נתון סריג דו-מימדי משולש שווה צלעות בעל צלע a, אשר מוגדרים בו הווקטורים הפרימיטיביים

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{x},\ \mathbf{a}_2 = a\left(\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y}\right)$$

(א) מצאו את הווקטורים הפרימיטיביים של הסריג ההופכי. מהי צורת הסריג המתקבל? מה אורך הצלע? מהי האוריינטציה ביחס לסריג הישיר?

(ב) מהו שטחו של אזור ברילואן הראשון? שרטטו את אזורי ברילואן הראשון, השני והשלישי.

(ג) מצאו את משפחת הישרים המתוארים ע"י אינדקסי מילר $(2,1)$, ואת המרחק בין ישרים אלו.

2. תכונות כלליות של סריג הופכי

(א) נסמן שני סריגי ברווה שונים בתור $\mathcal{L}_1$ ו-$\mathcal{L}_2$ (כל $\mathcal{L}_i$ הוא קבוצה אינסופית ובדידה של נקודות במרחב). נאמר ש-$\mathcal{L}_1$ הוא תת-סריג של $\mathcal{L}_2$ אם לכל $\mathbf{R} \in \mathcal{L}_1$ מתקיים $\mathbf{R} \in \mathcal{L}_2$, כלומר כל נקודת סריג שמופיעה ב-$\mathcal{L}_1$ מופיעה גם ב-$\mathcal{L}_2$ (דוגמה: סריג SC עם צלע a הוא תת-סריג של FCC ו-BCC עם צלע a של התא הקובי). הוכיחו שאם $\mathcal{L}_1$ הוא תת-סריג של $\mathcal{L}_2$, אז הסריג **ההופכי** של $\mathcal{L}_2$ הוא תת-סריג של הסריג ההופכי ל-$\mathcal{L}_1$ (כך שהסריגים ההופכיים ל-FCC ו-BCC הם תת-סריגים של הסריג ההופכי ל-SC).

(ב) נתון סריג ברווה תלת-מימדי. נסמן את נפח התא הפרימיטיבי בסריג הישיר בתור v. הראו כי נפחו של התא הפרימיטיבי של הסריג ההופכי, $\bar{v}$, מקיים

$$\bar{v} = \frac{(2\pi)^3}{v}$$

3. נתון סריג אורתורומבי ממורכז-פאה (face-centered orthorhombic): סריג תלת-מימדי שבו תא יחידה קונבנציונלי בנוי משלוש צלעות באורכים שונים $a \neq b \neq c$, כאשר הזוויות בין הצלעות האלו הן זוויות ישרות, ובמרכז כל פאה של מבנה זה נוספה נקודה. מהו הסריג ההופכי?

4. נתון סריג טריגונלי (trigonal) תלת-מימדי : סריג הנוצר משלושה וקטורים פרימיטיביים באורך זהה a, עם זווית זהה α בין כל שני וקטורים. הוכיחו כי הסריג ההופכי הוא טריגונלי, עם אורך צלע $b=\frac{2\pi}{a\sin\alpha\sin\alpha'}$ וזווית α' בין כל שני וקטורים פרימיטיביים, כאשר הזווית α' מוגדרת על ידי הקשר $\cos\frac{\alpha'}{2}=\frac{1}{2\cos\frac{\alpha}{2}}$.
<u>הדרכה</u> : מתוך הגדרת הווקטורים הפרימיטיביים של הסריג ההופכי תוכלו לקבל ביטויים עבור האורכים $|\mathbf{b}_i|$. בנוסף, תוכלו להשתמש בעובדה שהסריג ההופכי לסריג ההופכי הוא הסריג הישיר, ולכתוב משוואות נוספות עבור האורך a. מהמשוואות שמצאתם ניתן לחלץ את צורת הסריג ההופכי ואת הביטוי הנדרש לאורך b. לצורך מציאת הזווית α' ניתן להיעזר בזהות השימושית

$$(\mathbf{a}\times\mathbf{b})\cdot(\mathbf{c}\times\mathbf{d})=(\mathbf{a}\cdot\mathbf{c})\,(\mathbf{b}\cdot\mathbf{d})-(\mathbf{a}\cdot\mathbf{d})\,(\mathbf{b}\cdot\mathbf{c})$$

5. בסריג SC בעל קבוע סריג a, מצאו את אינדקסי מילר וכן את המרחק בין מישורים מקבילים, עבור משפחת המישורים שמכילה את המישור שעליו נמצאות שלוש נקודות הסריג הבאות

$$\begin{cases}\mathbf{R}_1=a\left(2\hat{x}+2\hat{y}+\hat{z}\right)\\ \mathbf{R}_2=a\left(5\hat{x}+\hat{y}-4\hat{z}\right)\\ \mathbf{R}_3=a\left(12\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}\right)\end{cases}$$

<u>הדרכה</u> : הווקטורים $\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j$ עבור $i\neq j$ הם וקטורי סריג ישיר שמקבילים למישור, ולכן הם מקיימים את התנאי $\mathbf{G}\cdot\left(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j\right)=0$ לכל וקטור סריג הופכי $\mathbf{G}$ שניצב למישור. אם נכתוב $\mathbf{G}=h\mathbf{b}_1+k\mathbf{b}_2+l\mathbf{b}_3$ נוכל לקבל מהתנאי הזה שתי משוואות בלתי-תלויות עבור המקדמים h,k,l. אמנם מדובר בשלושה מקדמים אבל אנחנו זקוקים רק ליחסים ביניהם, ולכן שתי המשוואות מספיקות לצורך מציאת אינדקסי מילר של משפחת המישורים הרלוונטית.

6. קבעו את אינדקסי מילר של המישור המוצג באיור, כאשר $\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2,\mathbf{a}_3$ הם וקטורים פרימיטיביים של הסריג הישיר :