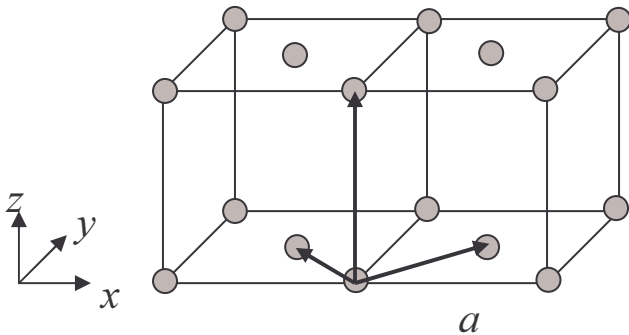


מבוא לתורת המצב המוצק פתרון תרגיל מס' 1

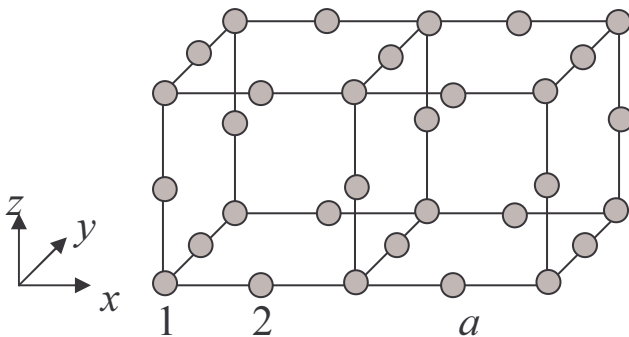
1.

א. זהו שריג Bravais. כל הנקודות שקולות זו לזו. וקטורי השריג הפרימיטיביים,

$\frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$, $\frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y})$, $a\hat{z}$ מגדירים שריג טטרגונלי פשוט (ראו טבלת השריגים).



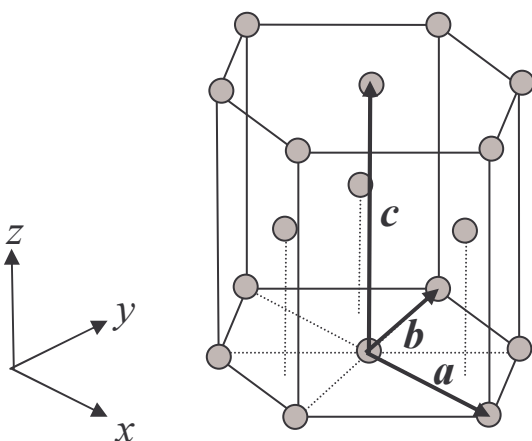
ב. זה אינו שריג Bravais. נקודות 1 ו-2 אינן שקולות, "רואות" סביבה שונה. למשל, לנקודה 1 יש ששה שכנים במרחק $a/2$ ואילו לנקודה 2 רק שניים כאלה.



וקטורי שריג קובי: $a\hat{x}$, $a\hat{y}$, $a\hat{z}$

ובסיס: $\left\{ \vec{0}, \frac{a}{2}\hat{x}, \frac{a}{2}\hat{y}, \frac{a}{2}\hat{z} \right\}$

ג. זה אינו שריג Bravais. אין שלשת וקטורים שקומבינציות שלמות שלה תבאנה אותנו הן לכל האטומים בגובה c והן לכל האטומים בגובה $c/2$.



וקטורי שריג הקסגונלי:

$$\vec{a} = a\hat{x}, \quad \vec{b} = -\frac{a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}, \quad \vec{c} = c\hat{z}$$

ובסיס:

$$\left\{ \vec{0}, \frac{2}{3}\vec{a} + \frac{1}{3}\vec{b} + \frac{1}{2}\vec{c} \right\} = \left\{ \vec{0}, \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2\sqrt{3}}\hat{y} + \frac{c}{2}\hat{z} \right\}$$

2. לפשטות ניקח בכל המקרים את קבוע השריג כיחידת האורך, $a = 1$.

א. sc. רדיוס הכדורים המקסימליים הוא $\frac{1}{2}$. תא הקוביה מכיל 8 שמיניות של כדור. נפח

הכדורים בתא הוא אפוא $\frac{\pi}{6} \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \left(\frac{1}{2}\right)^3 = \frac{\pi}{6}$. נפת התא הוא $1^3 = 1$. יחס האריזה הוא

לכן $\frac{\pi}{6} \approx 0.52$

ב. fcc. רדיוס הכדורים המקסימליים הוא $\frac{\sqrt{2}}{4}$. תא הקוביה מכיל 8 שמיניות של כדור ו-6

נפח התא $\cdot \left(8\frac{1}{8} + 6\frac{1}{2}\right) \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\sqrt{2}}{4}\right)^3 = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$ נפח הכדורים בתא הוא אפוא

הוא $1^3 = 1$. יחס האריזה הוא לכן $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.74$.

ג. hep אידיאלי. רדיוס הכדורים המקסימליים הוא $\frac{1}{2}$. תא המקבילון הנפרש ע"י וקטורי

השריג ההקסגונלי (ראו ציור בפתרון שאלה 1ג') מכיל 4 ששיות של כדור, 4 חלקי 12 של

כדור וכדור שלם אחד. נפח הכדורים בתא הוא אפוא $\left(4\frac{1}{6} + 4\frac{1}{12} + 1\right) \frac{4\pi}{3} \left(\frac{1}{2}\right)^3 = \frac{\pi}{3}$

נפח התא (ראינו בכתה של- hcr אידיאלי $c = a\sqrt{8/3}$) הוא $\frac{\sqrt{3}}{2} \sqrt{\frac{8}{3}} = \sqrt{2}$ יחס

האריזה הוא לכן $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.74$

3. נפח תא קוביה ב-bcc הוא a_1^3 והוא מכיל 2 אטומים (4 רביעיות + האטום המרכזי). נפח תא

המקבילון ב- hep אידיאלי הוא $\sqrt{2}a^3$ והוא מכיל 2 אטומים. כדי שהצפיפות תישאר אותה,

עלינו לדרוש $\frac{2}{a_1^3} = \frac{2}{\sqrt{2}a_2^3}$ ולכן $a_2 = 2^{-1/6}a_1 = 3.77 \text{ \AA}$