מבוא לתורת המצב המוצק
פתרון תרגיל מס׳ 2

.1

א. זהו שריג fcc.

ב. וקטורי השריג ההפכי הם:

$$\vec{A}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

$$\vec{A}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{A}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

השריג ההפכי הוא bcc עם קבוע שריג $4\pi/a$.

ג. בהצגה הפרימיטיבית (<u>לא</u> קונבנציונלית) וקטורי השריג ההפכי מקיימים

$$\vec{K}(h,k,l) = h\vec{A}_1 + k\vec{A}_2 + l\vec{A}_3 = \frac{2\pi}{a}[(h-k+l)\hat{x} + (h+k-l)\hat{y} + (-h+k+l)\hat{z}]$$

ועלינו לבחון את חמשת הוקטורים $|K|$ הקצרים ביותר. התוצאה:

$(h\ k\ l)$	$\lvert\vec{K}\rvert$	$d = 2\pi/\lvert\vec{K}\rvert$	$\sin\theta = \frac{\lambda}{2d}n$	θ
(1 0 0), (1 1 1)	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$	$\frac{a}{\sqrt{3}}$	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	25.7°
(1 1 0)	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{4}$	$\frac{a}{2}$	$\frac{1}{2}$	30°
(1 -1 0)	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{8}$	$\frac{a}{2\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	45°
(1 -1 1)	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{11}$	$\frac{a}{\sqrt{11}}$	$\frac{\sqrt{11}}{4}$	56.0°
(2 0 0)	$\frac{2\pi}{a}\sqrt{12}$	$\frac{a}{2\sqrt{3}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	60°

שימו לב, כי לזוית העקיפה החמישית (60°) יתרום לא רק הסדר הראשון (n=1) של (2 0 0) אלא גם הסדר השני (n=2) של (1 0 0) ו- (1 1 1).

2. מתנאי Bragg נובע: $\sin\theta_i/\sin\theta_1 = |\vec{K}_i|/|\vec{K}_1|$. מטבלת הזויות הנתונות נבנה אפוא טבלה של $\sin\theta_i/\sin\theta_1$:

A	B
1	1
1.156	1.408
1.633	1.731
1.917	1.998

א. נפתור בעזרת גורם מבנה.

i) שריג bcc: שריג קובי עם בסיס {(0,0,0), (½,½,½)}. גורם המבנה:

$$S(h,k,l) = f\left[1+e^{i\pi(h+k+l)}\right]$$

$(h\,k\,l)$	$\lvert\vec{K}\rvert$	$\lvert\vec{K}_i\rvert/\lvert\vec{K}_1\rvert$
(1 1 0)	$(2\pi/a)\sqrt{2}$	1
(2 0 0)	$(2\pi/a)\sqrt{4}$	$\sqrt{2}\approx 1.41$
(2 1 1)	$(2\pi/a)\sqrt{6}$	$\sqrt{3}\approx 1.73$
(2 2 0)	$(2\pi/a)\sqrt{8}$	2

השוואה לטבלת ה- $\sin\theta_i/\sin\theta_1$ מראה כי החומר בעל מבנה bcc הוא חומר B.

ii) שריג fcc: שריג קובי עם בסיס {(0,0,0), (½,½,0), (½,0,½), (0, ½,½)}. גורם המבנה:

$$S(h,k,l) = f\left[1+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(k+l)}\right]$$

$(h\,k\,l)$	$\lvert\vec{K}\rvert$	$\lvert\vec{K}_i\rvert/\lvert\vec{K}_1\rvert$
(1 1 1)	$(2\pi/a)\sqrt{3}$	1
(2 0 0)	$(2\pi/a)\sqrt{4}$	$2/\sqrt{3}\approx 1.16$
(2 2 0)	$(2\pi/a)\sqrt{8}$	$\sqrt{8/3}\approx 1.63$
(3 1 1)	$(2\pi/a)\sqrt{11}$	$\sqrt{11/3}\approx 1.92$

(השוו לטבלה בפתרון שאלה 1, שם השתמשנו בהצגה הפרימיטיבית.)

השוואה לטבלת ה- $\sin\theta_i/\sin\theta_1$ מראה כי החומר בעל מבנה fcc הוא חומר A.

ב. **bcc**: $\frac{|K_1|}{2\pi/a}=\sqrt{2}=\frac{(4\pi/\lambda)\sin\theta_1}{2\pi/a}\Rightarrow a=\frac{\sqrt{2}}{2\sin 14.4°}1.5\text{Å}\approx 4.26\text{Å}$

fcc: $\frac{|K_1|}{2\pi/a}=\sqrt{3}=\frac{(4\pi/\lambda)\sin\theta_1}{2\pi/a}\Rightarrow a=\frac{\sqrt{3}}{2\sin 21.1°}1.5\text{Å}\approx 3.61\text{Å}$

3.

א. שריג fcc מוגדר ע״י שלשת וקטורי השריג הפרימיטיביים:

$$\vec{a}_1=\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}),\ \vec{a}_2=\frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}),\ \vec{a}_3=\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z})$$

יהלום מוגדר בהצגה פרימיטיבית זו באמצעות השלשה הנ״ל + בסיס בן שני וקטורים:

$$\vec{\rho}_1=\vec{0},\qquad \vec{\rho}_2=\frac{1}{4}\vec{a}_1+\frac{1}{4}\vec{a}_2+\frac{1}{4}\vec{a}_3=\frac{a}{4}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$$

השריג ההופכי ל-fcc הוא bcc עם שלשת הוקטורים (ראו תרגיל 2 שאלה 1):

$$\vec{A}_1=\frac{2\pi}{a}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z}),\qquad \vec{A}_2=\frac{2\pi}{a}(-\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}),\qquad \vec{A}_3=\frac{2\pi}{a}(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z}),$$

כלומר, וקטור כלשהו בשריג ההופכי מתואר ע״י:

$$\vec{K}=h\vec{A}_1+k\vec{A}_2+l\vec{A}_3=\frac{2\pi}{a}[(h-k+l)\hat{x}+(h+k-l)\hat{y}+(-h+k+l)\hat{z}].$$

גורם המבנה בהצגה הפרימיטיבית הוא, אפוא,

$$s(\vec{K})=f(e^{i\vec{K}\cdot\vec{\rho}_1}+e^{i\vec{K}\cdot\vec{\rho}_2})=f(1+e^{i\frac{2\pi}{a}\frac{a}{4}[(h-k+l)+(h+k-l)+(-h+k+l)]})=f(1+e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)})=$$
$$=\begin{cases}2f, & \text{if } h+k+l=4n,\ n \text{ integer}\\ f(1+i), & \text{if } h+k+l=4n+1\\ 0, & \text{if } h+k+l=4n+2\\ f(1-i), & \text{if } h+k+l=4n+3\end{cases}$$

ב. גורם המבנה הוא סופי (אינו מתאפס) לכל $h+k+l\neq 4n+2$. לכן טבעת העקיפה הראשונה תתקבל עבור $(h\,k\,l)=(1\,0\,0)$ ודומיו.

ג. עבור טבעת העקיפה הראשונה: $\vec{K}_{\min}(1\,0\,0)=\frac{2\pi}{a}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z}) \Leftarrow |\vec{K}_{\min}|=\frac{2\pi}{a}\sqrt{3}$

$$\Leftarrow d_{\max}=\frac{2\pi}{|\vec{K}_{\min}|}=\frac{a}{\sqrt{3}} \Leftarrow \lambda_{\max}=2d_{\max}\sin(\pi/2)=\frac{2}{\sqrt{3}}a=4.11\text{Å}.$$

ד. בהצגה קונבנציונלית מוגדר יהלום כשריג sc, עם שלשת הוקטורים:

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

בתוספת בסיס בן שמונה וקטורים:

$$\vec{\rho}_1 = \vec{0}, \quad \vec{\rho}_2 = (\frac{1}{2}\frac{1}{2}0) = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}), \quad \vec{\rho}_3 = (0\frac{1}{2}\frac{1}{2}) = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}),$$

$$\vec{\rho}_4 = (\frac{1}{2}0\frac{1}{2}) = \frac{a}{2}(\hat{z}+\hat{x}), \quad \vec{\rho}_5 = (\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}) = \frac{a}{4}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}), \quad \vec{\rho}_6 = (\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}) = \frac{a}{4}(3\hat{x}+3\hat{y}+\hat{z}),$$

$$\vec{\rho}_7 = (\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}) = \frac{a}{4}(\hat{x}+3\hat{y}+3\hat{z}), \quad \vec{\rho}_8 = (\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}) = \frac{a}{4}(3\hat{x}+\hat{y}+3\hat{z})$$

הוקטור הראשון ממקם את האטומים על שריג ה-sc; השני, השלישי והרביעי מוסיפים את האטומים של ה-fcc במרכזי הפאות; החמישי, הששי, השביעי והשמיני מוסיפים את האטומים של מבנה היהלום במרחק (¼ ¼ ¼) (הוקטור $\vec{\rho}_2$ של ההצגה הפרימיטיבית) מארבעת הראשונים.

ה. השריג ההופכי בהצגה הקונבנציונלית הוא sc עם שלשת הוקטורים:

$$\vec{A}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x}, \quad \vec{A}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{y}, \quad \vec{A}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{z},$$

כלומר, וקטור כלשהו בשריג ההופכי מתואר ע"י:

$$\vec{K} = h\vec{A}_1 + k\vec{A}_2 + l\vec{A}_3 = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x}+k\hat{y}+l\hat{z}).$$

גורם המבנה בהצגה הקונבנציונלית הוא, אפוא,

$$s(\vec{K}) = f\sum_j e^{i\vec{K}\cdot\vec{\rho}_j} =$$

$$= f[1+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(k+l)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}+e^{i\frac{\pi}{2}(3h+3k+l)}+e^{i\frac{\pi}{2}(h+3k+3l)}+e^{i\frac{\pi}{2}(3h+k+3l)}]$$

צריך כעת לבדוק את כל המקרים השונים:

אם אחד משלשת האינדקסים $(h\ k\ l)$ זוגי והשניים האחרים אי-זוגיים – גורם המבנה מתאפס.

כנ"ל אם אחד האינדקסים אי-זוגי והשניים האחרים זוגיים.

אם כל השלושה אי-זוגיים – גורם המבנה סופי.

אם כל השלושה זוגיים – אזי גורם המבנה סופי אם $h+k+l=4n$ ומתאפס אחרת.

ו. מהניתוח הנ"ל עולה כי גורם המבנה אינו מתאפס אם כל שלושת האינדקסים אי-זוגיים, או אם סכומם הוא כפולה שלמה של 4. טבעת העקיפה הראשונה תתקבל, אפוא, עבור $(h\,k\,l)=(111)$ ודומיו (למשל, גם $(h\,k\,l)=(11{-}1)$). האינדקסים בהצגה הקונבנציונלית אינם זהים לאלה שקיבלנו בהצגה הפרימיטיבית (סעיף ב'), אבל משפחות המישורים ששתי השלשות מייצגות חייבות כמובן להיות בעלות מרווחים זהים. ואכן, אנו מקבלים בהצגה הנוכחית $\vec{K}_{\min}(11{-}1) = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z})$, בהתאמה לסעיף ג'.

ז. עבור שריג sc גורם המבנה סופי לכל $(h\ k\ l)$. למשל, משפחת המישורים המיוצגת בהצגה הקונבנציונלית ע"י $(h\,k\,l) = (1\,0\,0)$ תגרום לטבעת עקיפה בשריג sc אבל, כפי שראינו בסעיף ה', תאפס את גורם המבנה של יהלום.