FIZIKA TRDNE SNOVI
2007/08
vaja: Millerjevi indeksi

Jure Klučar

7. november 2007

1 Naloga

Kakšni so Millerjevi indeksi (oz. koliko jih manjka) za telesno centrirano (BCC) in ploskovno centrirano kubično mrežo (FCC)?

2 Millerjevi indeksi

Millerjevi indeksi, ponavadi jih označimo z h, k in l, so cela števila in nam določajo neko mrežno ravnino. Zaradi neenoličnosti vzamemo tako trojico, ki nima skupnega delitelja.
Po drugi strani pa nam lahko Millerjevi indeksi določajo nek vektor $\vec{K}$ recipročne mreže. Vektor $\vec{K}$ naj bo vzporeden z normalo mrežne ravnine, velikost najmanjšega vektorja pa naj bo $2\pi/d$, kjer je d razdalja med vzporednimi mrežnimi ravninami, ki določajo ta vektor. Imamo torej enolično zvezo med mrežnimi ravninami in vektorji recipročne mreže.

3 Navadna kubična mreža (SC)

Ugotovili smo, da lahko raziščemo M. indekse, se tem da gledamo vektorje recipročne mreže. Kot prvi in najosnovnejši primer vzamemo navadno kubično mrežo. Vektorje recipročne mreže izračunamo tako, da zadostimo enačbi

$$e^{i\vec{K}_{hkl}\cdot\vec{R}_n} = 1, \tag{1}$$

kjer so $\vec{R}_n$ v tem primeru vektorji navadne kubične mreže, vektorji $\vec{K}_{hkl}$ pa so vektorji ustrezne recipročne mreže.
Če zapišemo vektor $\vec{R}_n$ kot

$$\vec{R}_n = a(n_1, n_2, n_3) \tag{2}$$

in vektor $\vec{K}_{hkl}$ kot

$$\vec{K}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l) \tag{3}$$

in vstavimo v enacbo (1), dobimo

$$e^{i2\pi(hn_1+kn_2+ln_3)} = 1. \tag{4}$$

Očitno je, da vse trojice h, k in l zadostijo pogoju (4). Pri navadni kubični mreži (SC) imamo torej vse M. indekse.

4 Telesno centrirana kubična mreža (BCC)

Poglejmo še, kakšni so M. indeksi za BCC. Račun je podoben, vendar tu računamo še z bazo, saj imamo v osnovni celici še en atom v sredini celice. Do njega bo kazal bazni vektor. Vektor $\vec{R}_n$ bo za BCC izgledal

$$\vec{R}_n^{bcc} = \vec{R}_n^{sc} + baza = \vec{R}_n^{sc} + z_1\vec{r}_1 + z_2\vec{r}_2, \tag{5}$$

kjer sta z_1 in z_2 nič ali ena, bazna vektorja pa

$$\begin{aligned} \vec{r}_1 &= 0 \\ \vec{r}_2 &= \frac{a}{2}(1, 1, 1). \end{aligned} \tag{6}$$

Ko (5) in (6) poberemo skupaj in vstavimo v (1) dobimo zahtevo

$$e^{i\vec{K}_{hkl}\cdot\vec{R}_n^{bcc}} = e^{i\vec{K}_{hkl}\cdot\vec{R}_n^{sc}} e^{i\vec{K}_{hkl}\cdot z_2\vec{r}_2} = e^{i2\pi(hn_1+kn_2+ln_3)} e^{i2\pi z_2(\frac{h+k+l}{2})} = 1. \tag{7}$$

Enakost (7) mora biti zadoščena za vse možne n_1, n_2, n_3 in z_2 zato eksponenta ne moremo pobrati skupaj. Iz (7) razberemo, da enakost velja le če je vsota vseh M. indeksov soda. Možnosti so štiri.

h	**k**	**l**
sod	sod	sod
lih	lih	sod
lih	sod	lih
sod	lih	lih

Ker je vseh možnosti osem, lahko rečemo, da je recipročna mreža BCC ravno pol redkejša kot pri SC. To je logično, saj smo vzeli osnovno celico, ki zajema dva atoma.

5 Ploskovno centrirana kubična mreža (FCC)

Pri FCC je račun zelo podoben zgornjemu. V tem primeru imamo štiri bazne vektorje

$$\begin{aligned}\vec{r}_1 &= 0 \\ \vec{r}_2 &= \frac{a}{2}(1,1,0) \\ \vec{r}_3 &= \frac{a}{2}(1,0,1) \\ \vec{r}_4 &= \frac{a}{2}(0,1,1).\end{aligned} \tag{8}$$

Zapišemo

$$\vec{R}_n^{fcc} = \vec{R}_n^{sc} + baza = \vec{R}_n^{sc} + z_1\vec{r}_1 + z_2\vec{r}_2 + z_3\vec{r}_3 + z_4\vec{r}_4, \tag{9}$$

in nato (2) in (8) vstavimo v (9) in nato po (1) dobimo zahtevo

$$e^{i\vec{K}_{hkl}\cdot\vec{R}_n^{fcc}} = e^{i2\pi(hn_1+kn_2+ln_3)}e^{i2\pi z_2(\frac{h+k}{2})}e^{i3\pi z_3(\frac{h+l}{2})}e^{i2\pi z_4(\frac{k+l}{2})}, \tag{10}$$

ki mora veljati za vse n_1, n_2, n_3, z_2, z_3 in z_4. Po premisleku ugotovimo, da enakosti (10) zadostijo le vsi lihi ali pa vsi sodi M. indeksi, torej imamo le dve možnosti od osmih, kar pomeni da je recipročna mreža za FCC kar štirikrat bolj redka kot pri SC. Vzeli smo osnovno celico, ki zajema štiri atome.

h	**k**	**l**
sod	sod	sod
lih	lih	lih