1. Wigner-Seitzova celica

Albert Horvat

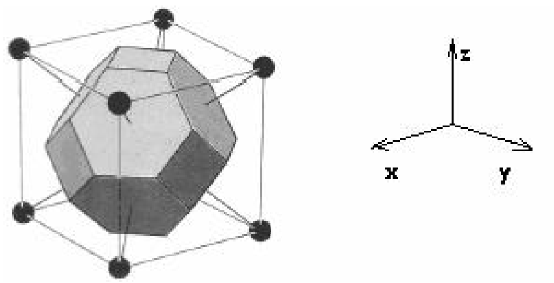
19. januar 2008

1 Naloga

Poišči Wigner-Seitzovo celico za bcc in fcc mrežo.

Wigner-Seitzovo celico konsturiramo tako, da izberemo mrežno točko (Bravejeve mreže), nato pa povlečemo črte do sosednjih točk. Na razpolovišcu teh črt pravokotno na nje narišemo ravnine (normala kaže v smeri črt). Najmanjši zaprt prostor dobljen na ta način je WS celica.

2 bcc



Slika 1: Wigner-Seitzova celica za bcc mrežo (Prisekan oktaeder). Izbira koordinatnega sistema na mreži. Izhodišče je v središču celice in ni vidno na sliki.

Za bcc mrežo preverimo ali je ena izmed ploskev WS celice na sliki res pravilni šestkotnik. Najbližji sosedi kakšne točke v bcc mreži so

$$\mathbf{a_1} = \pm a(1,0,0)$$
$$\mathbf{a_2} = \pm a(0,1,0)$$
$$\mathbf{a_3} = \pm a(0,0,1)$$

$$\mathbf{a_4} = \frac{a}{2}(\pm 1, \pm 1, \pm 1), \tag{1}$$

kjer je a dolžina osnovne celice. Ravnino opišemo z enačbo

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{n} = d \tag{2}$$

kjer je d razdalja ravnine od izhodišča, če je vektor normale $\mathbf{n}$ enotski, $\mathbf{r}$ pa so točke z ravnine. Omejil sem se le na nekaj točk, saj ostale dobimo analogno z menjavo ustreznih predznakov. Enačbe ravnin so naslednje:

$$x = \frac{a}{2} \quad y = \frac{a}{2} \quad z = \frac{a}{2} \quad x + y + z = \frac{3a}{4} \tag{3}$$

Presečišče treh ravnin lahko najdemo (tudi) tako, da rešimo enačbo $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, kjer v matriko po vrsticah A zložimo normale ravnin, v $\mathbf{b}$ pa konstante na desni strani enačb. Če je determinanta matrike A od nič različna, se ravnine sekajo v točki. Nato z leve pomnožimo enačbo z A^{-1}(ta obstaja saj det$A \neq 0$) in dobimo koordinate presečišča. Na ta način dobimo naslednje točke:

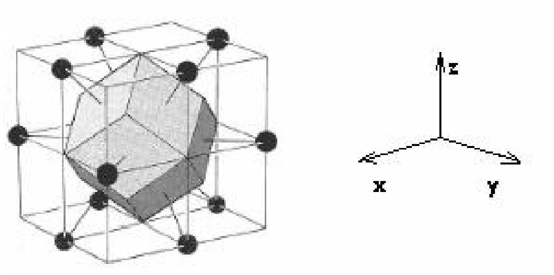
$$\begin{aligned}
\mathbf{t_1} &= (\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{4}) \\
\mathbf{t_2} &= (\frac{a}{2}, \frac{a}{4}, 0) \\
\mathbf{t_3} &= (\frac{a}{4}, 0, \frac{a}{2}) \\
\mathbf{t_4} &= (0, \frac{a}{4}, \frac{a}{2})
\end{aligned} \tag{4}$$

Ostalih točk šestkotnika nisem računal, saj so enačbe precej simetrične. Vse te točke ležijo v isti ravnini, namreč $x+y+z = \frac{3a}{4}$. Razdalje med sosednjimi točkami so enake ($\frac{a\sqrt{2}}{4}$). Na podlagi tega lahko zaključimo, da točke tvorijo oglišča pravilnega šestkotnika. Sicer pa je Wigner-Seitzova celica za bcc mrežo prisekan oktaeder.

3 fcc

Pri fcc mreži je bilo potrebno pokazati, da je razmerje med dolgo in kratko diagonalo romba na sliki $\sqrt{2}$. Spet poiščemo vektorje do najbližjih sosedov

$$\mathbf{a_1} = \frac{a}{2}(\pm 1, \pm 1, 0)$$



Slika 2: Wigner-Seitzova celica za fcc mrežo(Rombski dodekaeder).

$$
\begin{aligned}
\mathbf{a_2} &= \frac{a}{2}(\pm 1, 0, \pm 1) \\
\mathbf{a_3} &= \frac{a}{2}(0, \pm 1, \pm 1)
\end{aligned}
\tag{5}
$$

Nato poiščemo enačbe ravnin

$$
x + z = \frac{a}{2} \quad x + y = \frac{a}{2} \quad y + z = \frac{a}{2}. \tag{6}
$$

Poiščemo presečišče teh treh ravnin, nato pa s pomočjo slike dobimo še ostale točke

$$
\begin{aligned}
\mathbf{t_1} &= \frac{a}{4}(1, 1, 1) \\
\mathbf{t_2} &= \frac{a}{2}(1, 0, 0) \\
\mathbf{t_3} &= \frac{a}{4}(1, 1, -1) \\
\mathbf{t_4} &= \frac{a}{2}(0, 1, 0)
\end{aligned}
\tag{7}
$$

Izračunamo razmerje med kratko in dolgo diagonalo v rombu.

$$
\sqrt{\frac{\|\mathbf{t_1} - \mathbf{t_3}\|}{\|\mathbf{t_2} - \mathbf{t_3}\|}} = \frac{\sqrt{2}}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{8}
$$