Fizika trdne snovi, domača naloga

Gosti sklad ABC

Samo Ratnik (28010615), matematično-fizikalna smer

Naloga

Pokaži, da je 'ABC' različica heksagonalnega tesnega sklada ekvivalentna ploskovno centrirani kubični Bravaisovi mreži.

Rešitev

FCC mreža

Najprej si oglejmo ploskovno centrirano kubično (FCC) Bravaisovo mrežo. Eden od možnih (osnovnejših) izborov primitivnih vektorjev je

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}\,(1,1,0)\,, \qquad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\,(1,0,1)\,, \qquad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}\,(0,1,1)\,.$$

Očitno je dolžina vseh treh primitivnih vektorjev enaka ('permutacija' ničle). Izračunajmo jo

$$a_i = |\mathbf{a}_i| = |\mathbf{a}_1| = \sqrt{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_1} = \sqrt{a^2/2} = \frac{a}{\sqrt{2}}\,, \qquad (i = 1,2,3)\,.$$

Sedaj se spomnimo še formule iz srednje šole za kot med dvema vektorjema

$$\cos \sphericalangle(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{|\mathbf{a}||\mathbf{b}|}\,,$$

pa lahko izračunamo kote med vzajemnimi primitivnimi vektorji. Spet je

$$\cos \sphericalangle(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) = \cos \sphericalangle(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_3) = \cos \sphericalangle(\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) = \frac{(a/2)^2}{(a^2/2)} = \frac{1}{2}\,.$$

Tako smo ugotovili sledeče. Vse stranice lika, ki ga (tako izbrani) primitivni vektorji oklepajo, so enako dolge in koti med njimi so 60°. Spet iz srednje šole se lahko spomnimo, da se tak lik imenuje (pravilni) tetraeder. Na koncu omenimo še, da ponekod v literaturi FCC mrežo najdemo tudi pod imenom *tesno zložena kubična* (angl. cubic close-packed, CCP).

HCP mreža

Heksagonalni tesni sklad dobimo pri zlaganju gradnikov v (pravilno oz. enakostranično) trikotno mrežo v osnovni ravnini. V prvi višji ravnini gradnike postavimo v težišča trikotnikov osnovne ravnine. V drugi višji ravnini pa imamo dve možnosti. Gradnike lahko postavimo v enake lege (v xy-ravnini), kot so gradniki osnovne ravnine—ta tip mreže označimo z 'ABAB'. V tem primeru dobimo mrežo, ki jo ponavadi najdemo pod imenom *heksagonalna tesno zložena* (HCP). Lahko pa gradnike postavimo v težiščne lege trikotnikov iz prve višje ravnine—mreža 'ABCABC'. Izkaže se (in to bi radi dokazali), da v tem primeru dobimo FCC mrežo. Še največ o obliki opisanih mrež povedo priložene slike (glej spodaj).

Sedaj pokažimo zahtevano. Vektorji do leg gradnikov v osnovni in prvi višji ravnini so sledeči (a je pri tem razdalja med dvema gradnikoma)

$$\mathbf{a}_1 = a(1,0,0)\,, \qquad \mathbf{a}_2 = a(\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2},0)\,, \qquad \mathbf{a}_3 = a(\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{6},\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}})\,.$$

Poračunajmo dolžine teh vektorjev

$$|\mathbf{a}_1| = a\,, \qquad |\mathbf{a}_2| = \sqrt{a^2(\frac{1}{4}+\frac{3}{4})} = a\,, \qquad |\mathbf{a}_3| = \sqrt{a^2(\frac{1}{4}+\frac{1}{12}+\frac{2}{3})} = a\,.$$

In še kote med vzajemnimi vektorji (spet po zgornji formuli)

$$\cos\sphericalangle(\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2) = \cos\sphericalangle(\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_3) = \frac{a^2/2}{a^2} = \frac{1}{2}\,, \qquad \cos\sphericalangle(\mathbf{a}_2,\mathbf{a}_3) = \frac{a^2((1/4)+(3/12))}{a^2} = \frac{1}{2}\,.$$

Dobili smo pravzaprav tisto, kar smo že vedeli: tako zloženi gradniki tvorijo seveda spet pravilni tetraeder. Za dokaz ekvivalence, ki jo zahteva naloga, je treba povedati le še, da pri 'ABAB' konfiguraciji Bravaisovo mrežo ne sestavlja tak tetraeder, saj v drugi višji ravnini na mestu težišč trikotnikov iz prve višje ravnine ni gradnikov. Je pa obratno res pri 'ABCABC' skladu (spet so priložene slike najbrž vredne več kot besedni opis). S tem smo dokazali zahtevano.

Polnitvena razmerja (neobvezno)

Pri tesnih skladih je zanimivo omeniti tudi polnitvena razmerja. Polnitveno razmerje (označimo ga z α) je delež volumna primitivne celice, ki ga zapolnjujejo gradniki. Povedano z drugimi besedami: zanima nas, kako se splača zložiti pomaranče v zaboje, tako da jih bomo natovorili na ladjo čimveč (pomaranč, seveda). V nekaj točkah se sprehodimo čez zgodovino.

- Problem optimalnega zlaganja je (pričakovano) že kar star. Tako je leta 1611 Johannes Kepler postavil famozno domnevo, da noben sklad enakih krogel nima večjega (boljšega) polnitvenega razmerja kot FCC in HCP mreži (govorimo seveda o 3D evklidskem prostoru). Polnitveno razmerje obeh omenjenih mrež je

$$\alpha_{\mathrm{FCC}} = \alpha_{\mathrm{HCP}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.74048\,.$$

- Kepler svoje domneve ni znal dokazati. Namesto njega je to storil Gauß, leta 1831. Gaußov dokaz pa je bil nepopoln. Veljal je namreč le za mreže, kjer so gradniki razporejeni v oglišča pravilnih mnogokotnikov (t.i. regularne mreže). Da se pokazati, da obstajajo neregularne mreže, ki v majhnih volumnih dosegajo boljše pokritje od omenjenih dveh mrež. Ni pa enostavno zložiti takih mrež v sklade, ki bi napolnili cel prostor.

- Od Gaußa naprej ni bilo signifikantnih rezultatov in David Hilbert leta 1900 vključi problem med svojih 'triindvajset nerešenih matematičnih problemov'.

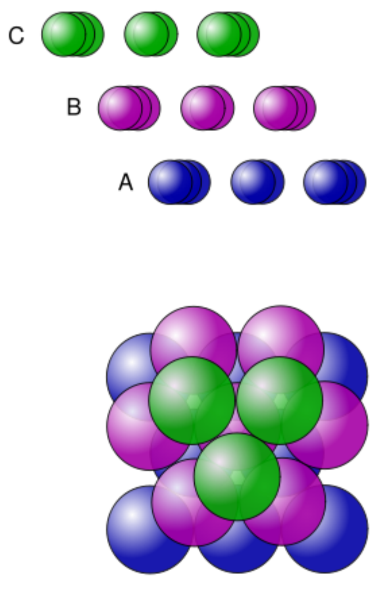
- Naslednji bolj pomemben korak se zgodi v letu 1958, ko angleški matematik Claude Ambrose Rogers postavi zgornjo mejo za polnitveno razmerje

$$\alpha_{\mathrm{MAX}} = \sqrt{18}(\cos^{-1}\frac{1}{3} - \frac{\pi}{3}) \approx 0.77964\,.$$

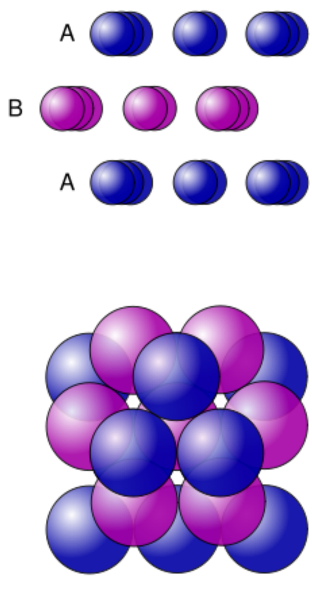
- Z razvojem računalnikov so se problema lotili numeriki. Leta 1998 je skupina pod vodstvom Thomasa Halesa objavila numerični dokaz. Ta je vseboval 250 strani zapiskov in 3 gigabajte programov, podatkov in rezultatov. V letu 2003 je revija Annals of Mathematics objavila delo—po štirih letih dela so uradni ocenjevalci revije dokazu pripisali '99-odstotno zanesljivost'.
- V letu 2003 je Hales najavil začetek iskanja formalnega dokaza za Keplerjevo domnevo. V najavi je ocenil, da bo iskanje vzelo verjetno približno dvajset let dela.

Več o tem na:
http://en.wikipedia.org/wiki/Kepler_conjecture
http://en.wikipedia.org/wiki/Close-packing
http://en.wikipedia.org/wiki/Sphere_packing

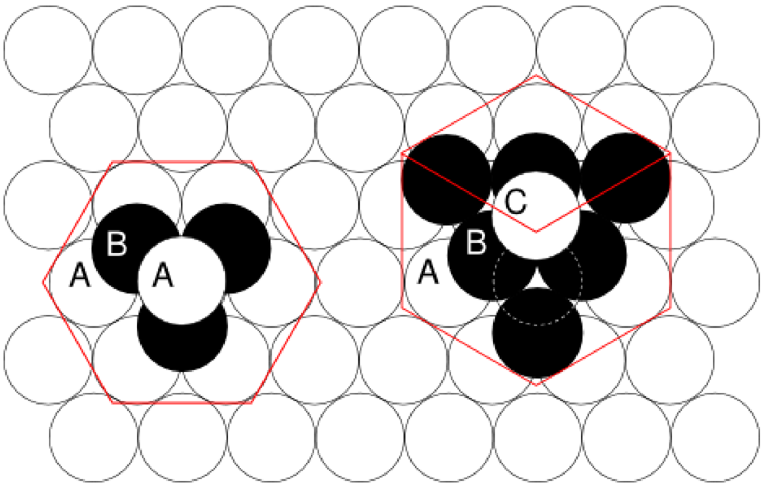
Na koncu še nekaj slik, ki ponazarjajo razliko med 'ABAB' in 'ABCABC' strukturo (vzete iz omenjenih spletnih strani).



Cubique à faces centrées ABC



Hexagonal compact ABA


A
B
A
A
B
C