Naloga

Izračunaj strukturni faktor za heksagonalno mrežo, zloženo na dva različna načina, $ABAB$ in $ABACABAC$.

Rešitev

Heksagonalna mreža

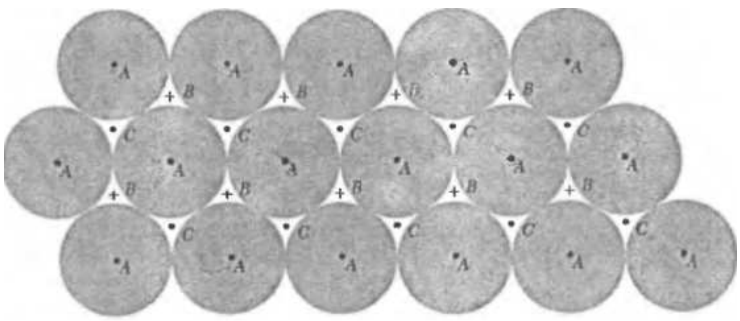
Najprvo se spomnimo Bravaisove mreže za heksagonalno strukturo, kjer zlagamo mreže neposredno eno nad drugo. Razdaljo med točkami heksagonalne mreže označimo z a, razdaljo med posameznimi mrežami z c. Tedaj se Bravaisova mreža izraža kot

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2}(\sqrt{3},1,0) \quad , \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(-\sqrt{3},1,0) \quad , \\ \mathbf{a}_3 &= c\,(0,0,1) \quad , \end{aligned} \tag{1}$$

njej pripadajoča recipročna mreža pa je oblike

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a}(\sqrt{3}/3,1,0) \quad , \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a}(-\sqrt{3}/3,1,0) \quad , \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi}{c}(0,0,1) \quad . \end{aligned} \tag{2}$$

Seveda zlaganje heksagonalnih mrež neposredno eno nad drugo ni edini možen način. Zaporedne mreže lahko tudi zamikamo na dva različna načina in tako tvorimo različne sklade. Z A označimo prvo možnost, ko se mreži prekrivata, z B in C pa označimo zamaknjeni mreži (Slika 1).

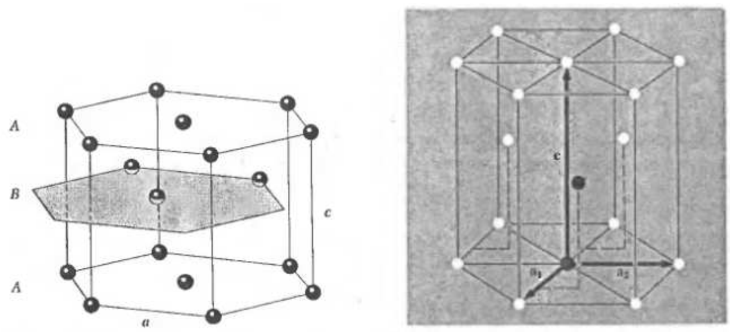


Slika 1: Zlaganje heksagonalnih mrež v sklade [1]

Sklad $ABAB$

Oglejmo si primer, ko heksagonalne mreže zlagamo v zaporedju $ABAB$. Problema se najlažje lotimo tako, da za osnovno celico vzamemo paralelepiped, določen z vektorji Bravaiseve mreže (1), napet med dvema A mrežama, vmesno B mrežo pa popišemo z bazo (Slika 2). Sklad $ABAB$ je tako navadna heksagonalna mreža z dvema baznima vektorjema,

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= 0 \quad , \\ \mathbf{r}_2 &= \frac{1}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{2}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_3 \quad . \end{aligned} \tag{3}$$



Slika 2: Sklad $ABAB$. Osnovno celico napenjajo vektorji $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_3$ in $\mathbf{a}_3$, na desni sliki pa sta s črno označena atoma baze. [1]

Strukturni faktor za takšno mrežo, sestavljeno iz enakih atomov, se izraža kot

$$S_{\mathbf{K}} = \sum_j \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}_j) \quad , \tag{4}$$

kjer je $\mathbf{K} = m_1\mathbf{b}_1 + m_2\mathbf{b}_2 + m_3\mathbf{b}_3$ vektor recipročne mreže, vsota pa teče po vektorjih baze. V našem primeru tako dobimo

$$S_{\mathbf{K}} = 1 + \exp\left(i2\pi\left[\frac{m_1}{3} + \frac{2m_2}{3} + \frac{m_3}{2}\right]\right) \quad . \tag{5}$$

Zanima nas, kdaj je strukturni faktor enak nič – na teh ravninah namreč pri sipanju svetlobe ne dobimo odboja. Vidimo, da bo strukturni faktor (5) enak nič, kadar bo eksponentni člen enak $-1 = e^{i\pi}$, oziroma ko bo izraz v oglatem oklepaju lih večkratnik $1/2$,

$$\frac{m_1}{3} + \frac{2m_2}{3} + \frac{m_3}{2} = \frac{2n+1}{2} \,, \quad n \in \mathcal{Z} \quad . \tag{6}$$

Posebej obravavajmo še primera, ko je valovni vektor vpadne svetlobe vzporeden z $\mathbf{a}_3$ ($m_1 = m_2 = 0$) in pravokoten nanj ($m_3 = 0$). Hitro se prepričamo, da bo v prvem primeru strukturni faktor enak nič za lihe vrednosti m_3, v drugem primeru pa bo strukturni faktor vedno od nič različen.

Sklad $ABACABAC$

Na enak način kot prej se lotimo primera, ko so mreže zložene v zaporedju $ABACABAC$. Osnovno celico izberemo podobno kot prej, le da se tokrat razteza med prvo in tretjo A mrežo, bazni vektorji pa so štirje:

$$\begin{aligned}
\mathbf{r}_1 &= 0 \quad , \\
\mathbf{r}_2 &= \frac{1}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{2}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{4}\mathbf{a}_3 \quad , \\
\mathbf{r}_3 &= \frac{2}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{3}{4}\mathbf{a}_3 \quad , \\
\mathbf{r}_4 &= \frac{1}{2}\mathbf{a}_3 \quad .
\end{aligned} \tag{7}$$

Strukturni faktor znova izračunamo po enačbi (4):

$$S_{\mathbf{K}} = 1 + e^{i2\pi\left[\frac{m_1}{3}+\frac{2m_2}{3}+\frac{m_3}{4}\right]} + e^{i2\pi\left[\frac{2m_1}{3}+\frac{m_2}{3}+\frac{3m_3}{4}\right]} + e^{i2\pi\left[\frac{m_3}{2}\right]} \quad . \tag{8}$$

V prejšnjem primeru, ko smo med dve A mreži vrinili dodatno B mrežo, smo pri sipanju svetlobe, vzporedne z $\mathbf{a}_3$, dobili prvi odboj pri $m_3 = 2$. Sedaj, ko se med A mrežama nahajajo tri dodatne (BAC), torej pričakujemo, da bo prvi neničeln odboj takšne svetlobe šele pri $m_3 = 4$, in s kratkim računom se lahko prepričamo, da je temu res tako.

Literatura

[1] Kittel, C., *Introduction to Solid State Physics*, 7th ed., Wiley, New York 1967

[2] Ashcroft, N.W. in Mermin, N.D., *Solid State Physics*, Harcourt College Pub. 1976