

**ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ**



**ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ  
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ  
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ**

## **Διδιάστατα πλέγματα Bravais**

**Στυλιανός Βασιλόγαμβρος  
Διπλωματική Εργασία**

**Επιβλέπων Κωνσταντίνος Σιμσερίδης**

**ΑΘΗΝΑ 2014**

# Περιεχόμενα

## Κεφάλαιο 1<sup>ο</sup> :

<b>Θεωρία</b>	<b>2</b>
Στερεό, Πλέγμα, Βάση	2
Είδη πλεγμάτων Bravais σε 1Δ και 2Δ	5
Κλάσμα πυκνής διατάξεως (atomic packing factor, APF)	6

## Κεφάλαιο 2<sup>ο</sup> :

<b>Πρόγραμμα</b>	<b>14</b>
Πρόγραμμα fortran εντοπισμού γειτόνων οιασδήποτε τάξεως σε κάθε ένα εκ των πέντε διδιαστάτων πλεγμάτων Bravais	14
Σχολιασμός του προγράμματος	20

## Κεφάλαιο 3<sup>ο</sup> :

<b>Συμπεράσματα και διαγράμματα για κάθε ένα από τα πέντε πλέγματα Bravais</b>	<b>27</b>
Τετραγωνικό πλέγμα (square lattice)	27
Ορθογωνικό πλέγμα (rectangular lattice)	31
Τριγωνικό πλέγμα (triangular lattice)	38
Πλάγιο πλέγμα (oblique lattice)	42
Ρομβικό πλέγμα (rhombic lattice)	49
<b>Βιβλιογραφία</b>	<b>58</b>

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1<sup>ο</sup> : Θεωρία

Εκτεταμένα στοιχεία θεωρίας μπορεί να βρει ο αναγνώστης σε ένα βιβλίο φυσικής στερεάς καταστάσεως [1,2,3].

## Στερεό, Πλέγμα, Βάση [4]

Ακολουθως, παρατίθενται ορισμένες βασικές έννοιες από την αναφορά [4]. Μπορούμε, τυπικώς, να ορίσουμε για όλες τις κατηγορίες στερεών:

$$\text{ΣΤΕΡΕΟ} = \text{ΠΛΕΓΜΑ} \oplus \text{ΒΑΣΗ}$$

**Πλέγμα** είναι ένα σύνολο μαθηματικών σημείων.

**Βάση** είναι ο δομικός λίθος, δηλαδή το άτομο, το μόριο, το ιόν, η πρωτεΐνη, το μακρομόριο κ.ο.κ. το οποίο τοποθετούμε με καθορισμένο προσανατολισμό σε κάθε πλεγματοειδές σημείο. Πλέγμα και βάση φτιάχνουν το στερεό.

Διακρίνονται οι παρακάτω κατηγορίες στερεών:

- **κρύσταλλοι** (crystals) ή **περιοδικοί κρύσταλλοι** (periodic crystals) ή **συμβατικοί κρύσταλλοι** (conventional crystals),
- **απεριοδικοί κρύσταλλοι** όπως **οιονεί κρύσταλλοι** (quasi crystals), **fractals** (μορφοκλάσματα), που χαρακτηρίζονται από **self-similarity** (αυτο-ομοιότητα).
- **άμορφα ή μη κρυσταλλικά στερεά ή ύαλοι** (amorphous or non-crystalline solids or glasses).

Σύμφωνα με την International Union of Crystallography από το **1992 ο ορισμός του κρυστάλλου έχει γενικευθεί** ώστε να περιλαμβάνει **όλα τα υλικά που έχουν ουσιαστικά καλά καθορισμένη εικόνα περιθλάσεως** ώστε το μεγαλύτερο μέρος της εντάσεως της περιθλάσεως να συγκεντρώνεται σε απότομες κορυφές παρά το πάντα παρόν διασπαρμένο υπόβαθρο. Ο ορισμός τροποποιήθηκε τότε ώστε να συμπεριλαμβάνει **περιοδικούς κρυστάλλους και απεριοδικούς κρυστάλλους**.

Η **διαφορά** μεταξύ **περιοδικών κρυστάλλων** και **απεριοδικών κρυστάλλων** εντοπίζεται στην **ύπαρξη συμμετρίας μετατοπίσεως ή μεταφοράς (translation symmetry) στους περιοδικούς κρυστάλλους**. Όμως οι περιοδικοί και απεριοδικοί κρύσταλλοι αλλά και τα fractals μπορεί να έχουν άλλες συμμετρίες όπως περιστροφής ως προς άξονα, ανακλάσεως σε επίπεδο, αντιστροφής ως προς σημείο, δηλαδή στις κατηγορίες αυτές **υπάρχει ΤΑΞΗ και μάλιστα μακράς εμβέλειας** (long range order) που καλύπτει δηλαδή όλο το στερεό.

Στην περίπτωση των **αμόρφων ΔΕΝ υπάρχει ΤΑΞΗ**. Για την ακρίβεια, δεν υπάρχει τάξη μακράς εμβέλειας, αλλά είναι δυνατόν να υπάρχει **τάξη μικρής εμβέλειας** (short range order) πράγμα που σημαίνει ότι μπορεί μια σε μικρή περιοχή να υπάρχει τάξη, αλλά διαφορετικές μικρές περιοχές δεν έχουν την ίδια μορφή τάξη.

Στην περίπτωση των **κρυστάλλων** ή αλλιώς **περιοδικών κρυστάλλων** ή αλλιώς **συμβατικών κρυστάλλων**, το **κρυσταλλικό πλέγμα** (crystal lattice) είναι ένα σύνολο μαθηματικών σημείων  $\mathbf{r}$  με περιοδικότητα στο χώρο που δημιουργείται παίρνοντας σε γραμμικό συνδυασμό ακέραιες φορές  $(n_1, n_2, n_3)$  τα γραμμικώς ανεξάρτητα **θεμελιώδη ανύσματα μεταφοράς ή μετατοπίσεως** (ΘΑΜ, primitive translation vectors) του πλέγματος  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ ,

$$\mathbf{r} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3. \quad (1)$$

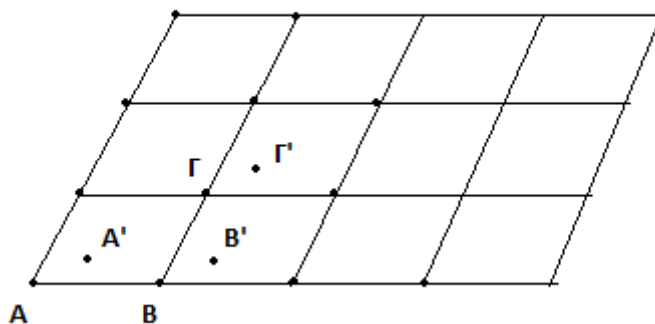
Τυπικά για  $n_1 = n_2 = n_3 = 0$  έχουμε την αρχή των αξόνων που ταυτίζεται με κάποιο πλεγματοκό σημείο. Εφ' όσον τα  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ , είναι θεμελιώδη, για κάθε σημείο  $A$  που ανήκει στο ΠΛΕΓΜΑ υπάρχουν ακέραιοι  $n_1, n_2, n_3$  τέτοιοι ώστε  $\mathbf{OA} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ , αλλά και αντιστρόφως, για κάθε τριάδα ακεραίων  $n_1, n_2, n_3$ , το σημείο  $n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$  ανήκει στο πλέγμα. Προφανώς, χρειαζόμαστε 3, 2, 1 ΘΑΜ, σε τρεις, δύο, μία διαστάσεις, αντιστοίχως. Να σημειωθεί ότι συνήθως υπάρχουν αρκετά σύνολα πιθανών θεμελιωδών ανυσμάτων. Δείτε για παράδειγμα την επόμενη Εικόνα. Λόγω της κατασκευής του κρυσταλλικού πλέγματος από τα θεμελιώδη ανύσματα μεταφοράς, οι κρύσταλλοι έχουν **μεταφορική συμμετρία** (translational symmetry) και είναι ακριβώς αυτό που τους διαχωρίζει από τους απεριοδικούς κρυστάλλους και τα άμορφα. Ένας κρύσταλλος μπορεί να έχει και άλλου είδους συμμετρία π.χ. **συμμετρία αντιστροφής ως προς σημείο, συμμετρία περιστροφής, συμμετρία ανακλάσεως σε επίπεδο**. Όμως, αποδεικνύεται (θεώρημα περιορισμού των δυνατών περιστροφών σε περιοδικούς κρυστάλλους) ότι μόνο συμμετρίες περιστροφής ως προς  $2\pi / n$ , όπου  $n = 2, 3, 4, 6$  επιτρέπονται στους περιοδικούς κρυστάλλους. Δηλαδή η συμμετρία μετατοπίσεως περιορίζει τη συμμετρία περιστροφής σε στροφές κατά  $180^\circ, 120^\circ, 90^\circ, 60^\circ$ . Τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως ορίζουν τη **θεμελιώδη κυψελίδα** (ΘΚ, primitive cell) με τις ιδιότητες:

1. η επανάληψη της ΘΚ με την βοήθεια των ΘΑΜ γεμίζει όλο το χώρο χωρίς κενά ή επικαλύψεις,
2. σε κάθε θεμελιώδη κυψελίδα αντιστοιχεί ένα πλεγματοκό σημείο. Να σημειωθεί ότι η θεμελιώδης κυψελίδα, στους περιοδικούς κρυστάλλους, είναι **μία αν και η εκλογή της δεν είναι μοναδική**. Δηλαδή μπορεί να υπάρχει και άλλη θεμελιώδης κυψελίδα ΘΚ' επαναλαμβάνοντας την οποία να γεμίζει όλος ο χώρος χωρίς κενά ή επικαλύψεις. Όμως δεν χρειάζεται να χρησιμοποιήσουμε δύο κυψελίδες μαζί για να καλύψουμε όλο το χώρο χωρίς κενά ή επικαλύψεις. Οι πιθανές διαφορετικές θεμελιώδεις κυψελίδες ενός συγκεκριμένου πλέγματος έχουν τον ίδιο όγκο  $V^{\Theta K}$  (σε 3Δ) ή το ίδιο εμβαδό  $S^{\Theta K}$  (σε 2Δ) ή το ίδιο μήκος  $L^{\Theta K}$  (σε 1Δ).

Μια κυψελίδα που χρησιμοποιείται ως μονάδα επαναλήψεως για να καλύψει όλο το χώρο χωρίς κενά ή επικαλύψεις ονομάζεται για το λόγο αυτό **μοναδιαία κυψελίδα** (unit cell). Βεβαίως,

μπορούμε να καλύψουμε το χώρο με μεγαλύτερη κυψελίδα από τη θεμελιώδη κυψελίδα ως μονάδα επαναλήψεως. Μια τέτοια μοναδιαία κυψελίδα περιέχει περισσότερα του ενός πλεγματικά σημεία, έχει μεγαλύτερο όγκο (3Δ) ή εμβαδό (2Δ) ή μήκος (1Δ) από μια θεμελιώδη κυψελίδα. Δηλαδή η ΘΚ είναι η μικρότερη μοναδιαία κυψελίδα. Με άλλα λόγια μια θεμελιώδης κυψελίδα είναι μοναδιαία αλλά δεν συμβαίνει αναγκαστικά το αντίστροφο.

Σε ένα πλέγμα Bravais όλα τα πλεγματικά σημεία είναι ισοδύναμα, ενώ σε ένα πλέγμα που δεν είναι Bravais μερικά από τα πλεγματικά σημεία δεν είναι ισοδύναμα. Ένα πλέγμα που δεν είναι πλέγμα Bravais μπορεί να θεωρηθεί ότι προκύπτει από συνδυασμό δύο ή περισσότερων πλεγμάτων Bravais που το ένα έχει διεισδύσει στο άλλο. Ένα τέτοιο παράδειγμα που δεν είναι πλέγμα Bravais βλέπουμε στην κάτωθι εικόνα:

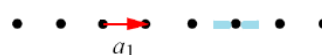


**Εικόνα 1.** Τα πλεγματικά σημεία A, B, Γ σχηματίζουν ένα πλέγμα Bravais και τα σημεία A', B', Γ' σχηματίζουν ένα άλλο πλέγμα Bravais.

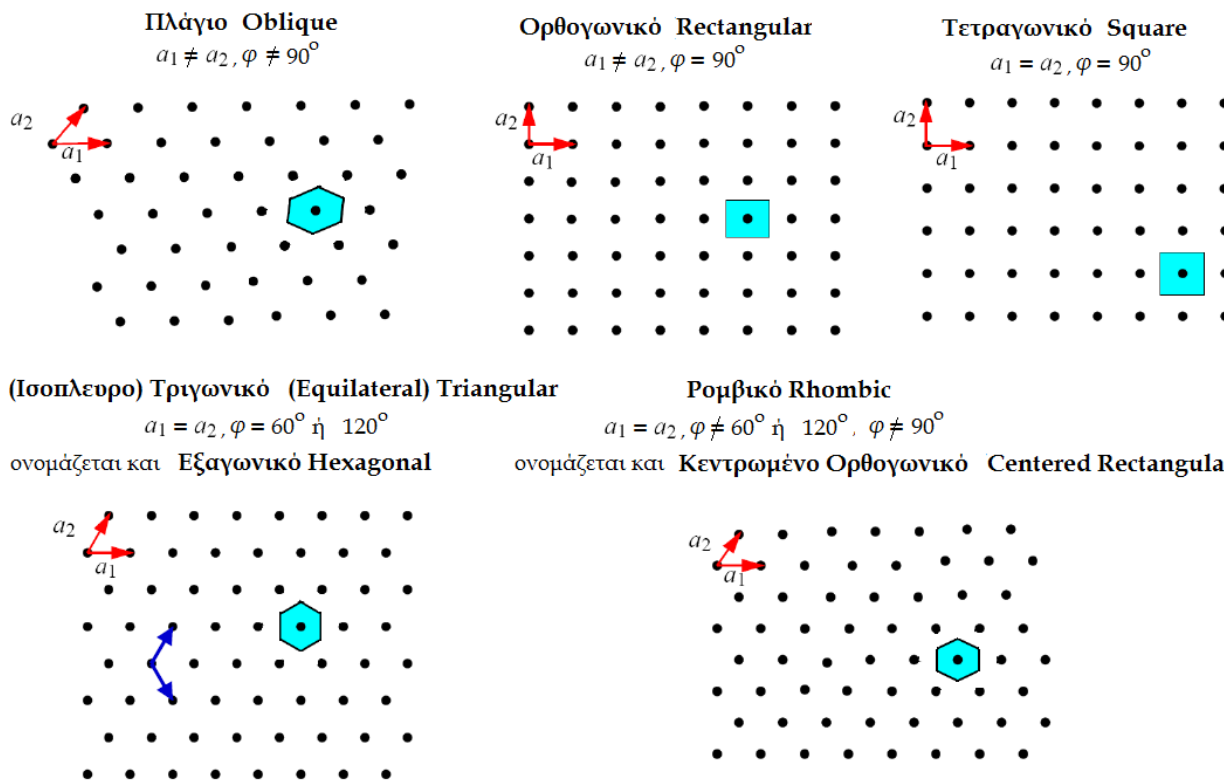
## Είδη πλεγμάτων Bravais σε 1Δ και 2Δ [4]

### Κρυσταλλικά πλέγματα ή αλλιώς πλέγματα Bravais σε 1Δ και 2Δ

Σε μία διάσταση (1Δ) υπάρχει ένα μόνο είδος κρυσταλλικού πλέγματος



Σε δύο διαστάσεις (2Δ) υπάρχουν πέντε μόνο είδη κρυσταλλικού πλέγματος



(Ισοπλευρο) Τριγωνικό (Equilateral) Triangular

$$a_1 = a_2, \varphi = 60^\circ \text{ ή } 120^\circ$$

ονομάζεται και Εξαγωνικό Hexagonal

Ρομβικό Rhombic

$$a_1 = a_2, \varphi \neq 60^\circ \text{ ή } 120^\circ, \varphi \neq 90^\circ$$

ονομάζεται και Κεντρωμένο Ορθογωνικό Centered Rectangular

**Εικόνα 2.** Τα είδη των κρυσταλλικών πλεγμάτων σε μία διάσταση (1Δ) και σε δύο διαστάσεις (2Δ). Φαίνονται τα ΘΑΜ και με γαλάζιο οι ΘΚ Wigner-Seitz. [4]

### Κρυσταλλικά πλέγματα ή αλλιώς πλέγματα Bravais σε μία διάσταση (1Δ) και δύο διαστάσεις (2Δ).

Τα είδη των κρυσταλλικών πλεγμάτων σε 1Δ και σε 2Δ απεικονίζονται στην Εικόνα 2. Σε μία διάσταση υπάρχει ένα μόνο είδος κρυσταλλικού πλέγματος και η ΘΚ είναι το ευθύγραμμο τμήμα που ενώνει δύο διαδοχικά πλεγματοικά σημεία με τη βοήθεια του ΘΑΜ. Το μήκος της ΘΚ είναι

$L^{\Theta K} = |\vec{a}_1|$ , όπου  $\vec{a}_1$  είναι το ΘΑΜ. Όπως αναμενόταν, η ΘΚ έχει  $2 \times \frac{1}{2} = 1$  πλεγματοικό σημείο. Η

**θεμελιώδης κυψελίδα Wigner-Seitz (ΘΚWS)** είναι η περιοχή του χώρου γύρω από ένα πλεγματοικό σημείο που βρίσκεται εγγύτερα σε αυτό το πλεγματοικό σημείο παρά στα υπόλοιπα πλεγματοικά σημεία. **Η ΘΚWS, καθώς ορίζεται με τον τρόπο που αναφέρθηκε, είναι μοναδική.**

Την περιοχή αυτή ορίζουν οι μεσοκάθετες των ευθυγράμμων τμημάτων που συνδέουν το

πλεγματικό σημείο με τα διπλανά του πλεγματικά σημεία. Σε 1Δ η ΘΚWS είναι το γαλάζιο ευθύγραμμο τμήμα που σημειώνεται στην Εικόνα 2. Προφανώς  $L_{WS}^{ΘΚ} = 2 \frac{|\vec{a}_1|}{2} = |\vec{a}_1|$ .

Σε 2Δ το παραλληλόγραμμο που ορίζουν τα ΘΑΜ είναι η ΘΚ, ενώ η γαλάζια περιοχή γύρω από κάποιο πλεγματικό σημείο αντιπροσωπεύει τη θεμελιώδη κυψελίδα Wigner-Seitz. Σε 2Δ το εμβαδό της θεμελιώδους κυψελίδας είναι  $S^{ΘΚ} = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|$ , όπου  $\vec{a}_1, \vec{a}_2$  είναι τα ΘΑΜ. Προφανώς θα πρέπει να ισχύει  $S_{WS}^{ΘΚ} = S^{ΘΚ}$  αφού και οι δύο έχουν ένα πλεγματικό σημείο και γεμίζουν το 2Δ χώρο χωρίς κενά ή επικαλύψεις. Σε 2Δ υπάρχουν πέντε μόνο κρυσταλλικά πλέγματα που απεικονίζονται στην ίδια Εικόνα. Στο **πλάγιο** (oblique) πλέγμα  $|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$  και η μεταξύ τους γωνία  $\varphi \neq 90^\circ$ . Στο **ορθογωνικό** (rectangular) πλέγμα  $|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$  αλλά  $\varphi = 90^\circ$ . Στο **τετραγωνικό** (square) πλέγμα  $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$  και  $\varphi = 90^\circ$ . Στο **(ισόπλευρο) τριγωνικό** ((equilateral) triangular) πλέγμα  $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$  και  $\varphi = 60^\circ$  ή εναλλακτικά  $\varphi = 120^\circ$ . Το (ισόπλευρο) τριγωνικό πλέγμα ονομάζεται εναλλακτικά και **εξαγωνικό** (hexagonal). Στο **ρομβικό** (rhombic) πλέγμα  $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$  αλλά  $\varphi \neq 90^\circ$  και  $\varphi \neq 60^\circ$  ή  $120^\circ$ . Το ρομβικό πλέγμα ονομάζεται εναλλακτικά και **κεντρωμένο ορθογωνικό** (centered rectangular).

## Κλάσμα πυκνής διατάξεως (atomic packing factor, APF)

Στα πλαίσια αυτής της εργασίας θα υπολογίσουμε για κάθε ένα από τα πέντε πλέγματα Bravais το κλάσμα πυκνής διατάξεως. Διογκώνουμε τα πλεγματικά σημεία -που γίνονται έτσι κυκλικοί δίσκοι- έως ότου ακουμπήσουν, οπότε δεν επιτρέπεται περαιτέρω δίογκωση. Ας ονομάσουμε  $D$  τη διάμετρο των «σκληρών» (δηλαδή μη δυνάμενων να διογκωθούν περαιτέρω) αυτών κυκλικών δίσκων. Τότε υπολογίζεται ο λόγος της επιφάνειας της κατειλημμένης από τους σκληρούς κυκλικούς δίσκους κυψελίδας προς την επιφάνεια όλης της κυψελίδας. Ο λόγος αυτός ονομάζεται κλάσμα πυκνής διατάξεως (atomic packing factor, APF):

$$APF = \frac{S_{κατειλημμένης\ κυψελίδας}}{S_{κυψελίδας}} \quad (2)$$

Συγκρίνοντας κάθε ένα από τους πέντε αυτούς λόγους θα βρούμε ποιος είναι ο μεγαλύτερος και άρα θα συμπεράνουμε ποια δομή είναι πιο πυκνή. Ας αναλύσουμε τον APF για κάθε 2Δ πλέγμα.

### Τετραγωνικό πλέγμα

Ας υποθέσουμε ότι τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως είναι  $\mathbf{a}_1 = a \mathbf{i}$  και  $\mathbf{a}_2 = a \mathbf{j}$ . Επειδή  $a = D = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$ , παρατηρώντας τη θεμελιώδη κυψελίδα που φαίνεται στην Εικόνα 3, επειδή αυτή έχει 4 πλεγματικά σημεία που της ανήκουν όμως κατά το  $\frac{1}{4}$ , υπολογίζουμε:

$$\text{APF}_{\text{square}} = \frac{4 \frac{1}{4} \pi \left(\frac{D}{2}\right)^2}{D^2} = \frac{\pi}{4} \approx 0.785 \quad (3)$$

### Τριγωνικό πλέγμα

Ας υποθέσουμε ότι εκλέγουμε τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως έτσι ώστε  $\mathbf{a}_1 = a \mathbf{i}$  και  $\mathbf{a}_2 = a \cos 60^\circ \mathbf{i} + a \sin 60^\circ \mathbf{j}$ . Αφού  $a = D = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$ , παρατηρώντας τη θεμελιώδη κυψελίδα στην Εικόνα 4, επειδή αυτή έχει 4 πλεγματικά σημεία που της ανήκουν όμως τα δύο κατά το  $\frac{1}{3}$  και τα άλλα δύο κατά το  $\frac{1}{6}$ , υπολογίζουμε:

$$\text{APF}_{\text{triangular}} = \frac{\left(2 \frac{1}{3} + 2 \frac{1}{6}\right) \pi \left(\frac{D}{2}\right)^2}{2 \frac{a^2 \sqrt{3}}{4}} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \approx 0.907 \quad (4)$$

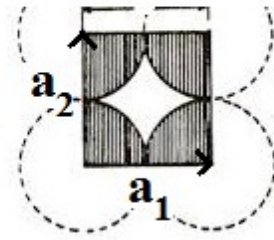
### Ορθογωνικό πλέγμα

Ας υποθέσουμε ότι τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως είναι  $\mathbf{a}_1 = a \mathbf{i}$  και  $\mathbf{a}_2 = b \mathbf{j}$ . Ας υποθέσουμε ακόμα ότι  $a > b$  και  $a = \lambda b$ , άρα  $\lambda > 1$ , οπότε  $D = |\mathbf{a}_2| = b$  και  $|\mathbf{a}_1| = \lambda D$ . Παρατηρώντας τη θεμελιώδη κυψελίδα που φαίνεται στην Εικόνα 5, επειδή αυτή έχει 4 πλεγματικά σημεία που της ανήκουν όμως κατά το  $\frac{1}{4}$ , υπολογίζουμε:

$$\text{APF}_{\text{rectangular}} = \frac{4 \frac{1}{4} \pi \left(\frac{D}{2}\right)^2}{ab} = \frac{\pi b}{4a} = \frac{\pi}{4 \lambda} \approx 0.785 \frac{1}{\lambda} \quad (5)$$

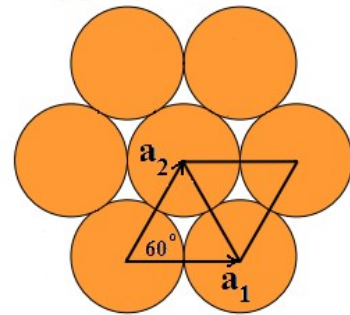
Άρα, αφού  $\lambda > 1$ ,  $\text{APF}_{\text{rectangular}} = \frac{\pi}{4 \lambda} < \frac{\pi}{4} = \text{APF}_{\text{square}}$ .

$$a = D = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$$



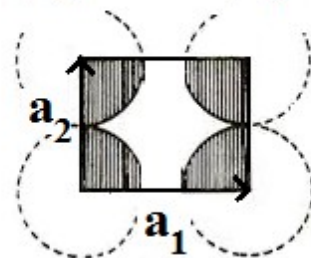
**Εικόνα 3.** Για τον υπολογισμό του APF στο τετραγωνικό πλέγμα.

$$a = D = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$$



**Εικόνα 4.** Για τον υπολογισμό του APF στο τριγωνικό πλέγμα.

$$D = |\mathbf{a}_2| \quad |\mathbf{a}_1| = \lambda D$$

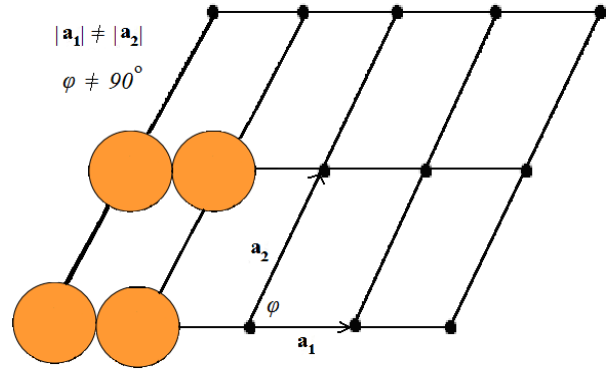


**Εικόνα 5.** Για τον υπολογισμό του APF στο ορθογωνικό πλέγμα.



### Πλάγιο πλέγμα

Έστω ότι τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως  $\mathbf{a}_1 = |\mathbf{a}_1| \mathbf{i} = a \mathbf{i}$  και  $\mathbf{a}_2 = |\mathbf{a}_2| \cos\varphi \mathbf{i} + |\mathbf{a}_2| \sin\varphi \mathbf{j}$ , όπου  $\varphi \neq 90^\circ$ . Ας υποθέσουμε ακόμη ότι  $|\mathbf{a}_2| = \lambda |\mathbf{a}_1|$  με  $\lambda > 1$ , οπότε  $|\mathbf{a}_2| / |\mathbf{a}_1| = \lambda$ . Επειδή, τότε  $a_2 > a_1$ , προκύπτει  $D = |\mathbf{a}_1| = a$ . Παρατηρώντας τη θεμελιώδη κυψελίδα που φαίνεται στην Εικόνα 6, επειδή αυτή έχει 4 πλεγματικά σημεία που της ανήκουν όμως τα 2 κατά  $\varphi/2\pi$  και τα άλλα 2 κατά  $(\pi-\varphi)/2\pi$ , υπολογίζουμε:



**Εικόνα 6.** Για τον υπολογισμό του APF στο πλάγιο πλέγμα.

$$APF_{\text{oblique}} = \frac{\pi \left(\frac{D}{2}\right)^2}{|\mathbf{a}_1| |\mathbf{a}_2| \sin \varphi} = \frac{\pi D^2}{4\lambda D^2 \sin \varphi} = \frac{\pi}{4 \sin \varphi} \quad (6).$$

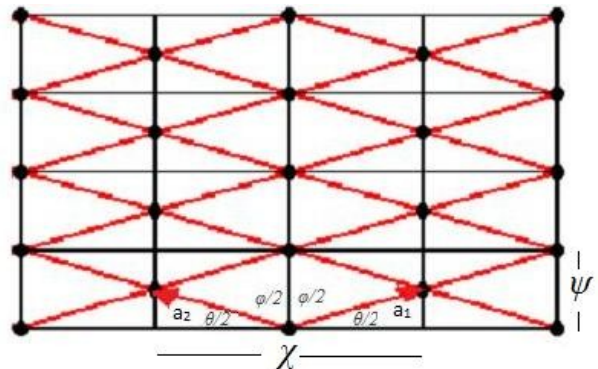
### Ρομβικό πλέγμα

Στο ρομβικό πλέγμα έχουμε  $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$  και τον περιορισμό  $\varphi \neq 90^\circ$  και  $\varphi \neq 60^\circ$  ή  $\varphi \neq 120^\circ$  (για να μην έχουμε κάποιο εκφυλισμό και πάμε σε άλλο πλέγμα). Ας υποθέσουμε ότι τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως είναι:

$$\mathbf{a}_1 = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \mathbf{i} + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \mathbf{j} \text{ και}$$

$$\mathbf{a}_2 = -\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \mathbf{i} + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \mathbf{j}.$$

Παρατηρώντας την Εικόνα 7, φαίνεται ότι η μικρότερη απόσταση κατά την οποία μπορούν να πλησιάσουν οι σκληροί κυκλικοί δίσκοι μπορεί να είναι είτε  $\chi$  είτε  $\psi$  είτε  $a$ , πράγμα που εξαρτάται από τη γωνία μεταξύ των  $\Theta AM$ . Οπότε χρειάζεται διερεύνηση. Υπάρχουν λοιπόν 3 ακόλουθες υποπεριπτώσεις.



**Εικόνα 7.** Για τον υπολογισμό του APF στο ρομβικό πλέγμα.

Ας θυμηθούμε το νόμο των ημιτόνων:

$$\frac{a}{\sin A} = \frac{b}{\sin B} = \frac{c}{\sin C} = d, \quad (7)$$

όπου  $A, B, C$  είναι οι γωνίες και  $a, b, c$ , οι αντίστοιχες πλευρές ενός τριγώνου  $ABC$  και  $d$  η διάμετρος του περιγεγραμμένου του κύκλου. Ας τον εφαρμόσουμε στο τρίγωνο της μισής θεμελιώδους κυψελίδας της Εικόνας 7.

$$\frac{\psi}{\sin \theta} = \frac{a}{\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)} \quad (8)$$

και επειδή  $\varphi + \theta = \pi$ , συνεπάγεται ότι  $\frac{\varphi}{2} = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}$ . Άρα, οι εξισώσεις (7) και (8) συνεπάγονται

$$\begin{aligned} \frac{\psi}{\sin \theta} &= \frac{a}{\sin\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right)} = \frac{a}{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)} \Rightarrow \\ \psi &= a \frac{\sin \theta}{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)} \Rightarrow \\ \psi &= a \frac{2 \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)} \Rightarrow \\ \psi &= 2a \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = 2a \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \end{aligned} \quad (9)$$

Αν θέλουμε  $\psi > a$ , έχουμε:

$$\psi > a \Leftrightarrow 2a \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) > a \Leftrightarrow \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) > \frac{1}{2} \Leftrightarrow \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) > \sin\left(\frac{\pi}{6}\right)$$

Όμως

$$\theta + \varphi = \pi \Rightarrow \theta < \pi \Rightarrow \frac{\theta}{2} < \frac{\pi}{2}$$

$$\theta + \varphi = \pi \Rightarrow \varphi < \pi \Rightarrow \frac{\varphi}{2} < \frac{\pi}{2}$$

Δηλαδή οι γωνίες  $\theta/2$  και  $\varphi/2$  ανήκουν στο 1<sup>ο</sup> τεταρτημόριο όπου η συνάρτηση ημίτονο είναι γνησίως αύξουσα (γ.α.). Αυτό θα το χρησιμοποιήσουμε λίγο παρακάτω.

Άρα

$$\frac{\theta}{2} > \frac{\pi}{6} \Rightarrow \theta > \frac{\pi}{3} \Leftrightarrow \varphi < \frac{2\pi}{3}.$$

Δηλαδή

$$\psi > a \Leftrightarrow \varphi < \frac{2\pi}{3},$$

$$\psi < a \Leftrightarrow \varphi > \frac{2\pi}{3}.$$

Προσοχή, εάν  $\psi = a \Leftrightarrow \varphi = \frac{2\pi}{3}$ , οπότε έχουμε τριγωνικό πλέγμα.

Ας εφαρμόσουμε πάλι το νόμο των ημιτόνων, τώρα περιλαμβάνοντας την πλευρά μήκους  $\chi$ .

$$\frac{\chi}{\sin \varphi} = \frac{a}{\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)} \Rightarrow \chi = \alpha \frac{\sin \varphi}{\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)} = \alpha \frac{\sin \varphi}{\cos\left(\frac{\varphi}{2}\right)} = \alpha \frac{2 \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right)}{\cos\left(\frac{\varphi}{2}\right)} \Rightarrow$$

$$\chi = 2a \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) = 2a \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (10)$$

$$\psi = a \Leftrightarrow 2a \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = a \Leftrightarrow \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{1}{2} = \sin\left(\frac{\pi}{6}\right) \Rightarrow \frac{\theta}{2} = \frac{\pi}{6} \Rightarrow \theta = \frac{\pi}{3}, \varphi = \frac{2\pi}{3}.$$

$$\chi = a \Leftrightarrow 2a \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) = a \Leftrightarrow \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) = \frac{1}{2} = \sin\left(\frac{\pi}{6}\right) \Rightarrow \frac{\varphi}{2} = \frac{\pi}{6} \Rightarrow \varphi = \frac{\pi}{3}, \theta = \frac{2\pi}{3}.$$

$$\psi > a \Leftrightarrow 2a \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) > a \Leftrightarrow \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) > \frac{1}{2} = \sin\left(\frac{\pi}{6}\right) \Leftrightarrow \frac{\theta}{2} > \frac{\pi}{6} \Leftrightarrow \theta > \frac{\pi}{3} \Leftrightarrow \varphi < \frac{2\pi}{3}$$

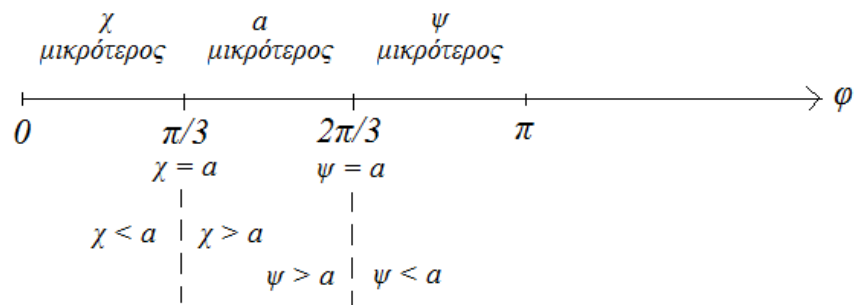
$$\psi < a \Leftrightarrow 2a \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) < a \Leftrightarrow \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) < \frac{1}{2} = \sin\left(\frac{\pi}{6}\right) \Leftrightarrow \frac{\theta}{2} < \frac{\pi}{6} \Leftrightarrow \theta < \frac{\pi}{3} \Leftrightarrow \varphi > \frac{2\pi}{3}$$

$$\chi > a \Leftrightarrow 2a \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) > a \Leftrightarrow \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) > \frac{1}{2} = \sin\left(\frac{\pi}{6}\right) \Leftrightarrow \frac{\varphi}{2} > \frac{\pi}{6} \Leftrightarrow \varphi > \frac{\pi}{3} \Leftrightarrow \theta < \frac{2\pi}{3}$$

$$\chi < a \Leftrightarrow 2a \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) < a \Leftrightarrow \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) < \frac{1}{2} = \sin\left(\frac{\pi}{6}\right) \Leftrightarrow \frac{\varphi}{2} < \frac{\pi}{6} \Leftrightarrow \varphi < \frac{\pi}{3} \Leftrightarrow \theta > \frac{2\pi}{3}$$

Έχουμε χρησιμοποιήσει ότι οι γωνίες  $\theta/2$  και  $\varphi/2$  ανήκουν στο  $1^\circ$  τεταρτημόριο όπου η συνάρτηση ημίτονο είναι γνησίως αύξουσα (γ.α.). Συνοψίζοντας, στο ρομβικό πλέγμα, έχουμε τις ακόλουθες τρεις περιπτώσεις. Η Εικόνα 8 μας βοηθά να τις κατανοήσουμε.

**Εικόνα 8.** Για τον υπολογισμό του APF στο ρομβικό πλέγμα διακρίνονται τρεις περιπτώσεις. Η γωνία  $\varphi$  καθορίζει ποια από τις αποστάσεις  $\chi$ ,  $\psi$ ,  $a$  είναι μικρότερη.



### ΠΡΩΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

Όταν η γωνία  $\varphi$  ανήκει στο διάστημα  $\left(\frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}\right)$ , τότε  $D = a$ . Οπότε

$$\text{APF}_{\text{rhombic}} = \frac{\pi \left(\frac{D}{2}\right)^2}{a^2 \sin \varphi} = \frac{\pi a^2}{4a^2 \sin \varphi} = \frac{\pi}{4 \sin \varphi} \quad (11)$$

Επιπλέον,

$$\frac{\pi}{3} < \varphi < \frac{2\pi}{3} \Leftrightarrow 1 > \sin \varphi > \frac{\sqrt{3}}{2} \Leftrightarrow 1 < \frac{1}{\sin \varphi} < \frac{2}{\sqrt{3}}.$$

$$\text{Άρα } \frac{\pi}{4} < \text{APF}_{\text{rhombic}} < \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \Rightarrow$$

$$\text{APF}_{\text{square}} < \text{APF}_{\text{rhombic}} < \text{APF}_{\text{triangular}}$$

### ΔΕΥΤΕΡΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

Όταν η γωνία  $\varphi$  ανήκει στο διάστημα  $\left(\pi, \frac{2\pi}{3}\right)$ , τότε  $D = \psi$ . Οπότε

$$\begin{aligned} \text{APF}_{\text{rhombic}} &= \frac{\pi \left(\frac{D}{2}\right)^2}{a^2 \sin \varphi} = \frac{\pi \psi^2}{4a^2 \sin \varphi} \stackrel{(9)}{\Rightarrow} \\ \text{APF}_{\text{rhombic}} &= \frac{\pi a^2 4 \cos^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)}{4a^2 \sin \varphi} = \pi \frac{\cos^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)}{2 \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right)} \Rightarrow \\ \text{APF}_{\text{rhombic}} &= \frac{\pi}{2} \cot\left(\frac{\varphi}{2}\right). \end{aligned} \quad (12)$$

Επειδή

$$\pi > \varphi > \frac{2\pi}{3} \Rightarrow \frac{\pi}{2} > \frac{\varphi}{2} > \frac{\pi}{3}$$

Ακόμη

$$\begin{aligned} \cot\left(\frac{\pi}{2}\right) &= \frac{\cos\left(\frac{\pi}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{2}\right)} = \frac{0}{1} = 0, \\ \cot\left(\frac{\pi}{3}\right) &= \frac{\cos\left(\frac{\pi}{3}\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{3}\right)} = \frac{\frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}} = \frac{1}{\sqrt{3}}. \end{aligned}$$

Οπότε

$$0 < \cot\left(\frac{\varphi}{2}\right) < \frac{1}{\sqrt{3}} \Rightarrow$$

$$0 < \text{APF}_{\text{rhombic}} < \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \Rightarrow$$

$$0 < \text{APF}_{\text{rhombic}} < \text{APF}_{\text{triangular}}$$

### ΤΡΙΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

Όταν η γωνία  $\varphi$  ανήκει στο διάστημα  $\left(0, \frac{\pi}{3}\right)$ , τότε  $D = \chi$ . Οπότε

$$\text{APF}_{\text{rhombic}} = \frac{\pi\left(\frac{D}{2}\right)^2}{a^2 \sin \varphi} = \frac{\pi\chi^2}{4a^2 \sin \varphi} \stackrel{(10)}{\Rightarrow}$$

$$\text{APF}_{\text{rhombic}} = \frac{\pi a^2 4 \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)}{4a^2 \sin \varphi} = \pi \frac{\sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)}{2 \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right)} \Rightarrow$$

$$\text{APF}_{\text{rhombic}} = \frac{\pi}{2} \tan\left(\frac{\varphi}{2}\right) \tag{13}$$

Επειδή

$$0 < \varphi < \frac{\pi}{3} \Rightarrow 0 < \frac{\varphi}{2} < \frac{\pi}{6}$$

Ακόμη

$$\tan 0 = \frac{\sin 0}{\cos 0} = \frac{0}{1} = 0,$$

$$\tan\left(\frac{\pi}{6}\right) = \frac{\sin\left(\frac{\pi}{6}\right)}{\cos\left(\frac{\pi}{6}\right)} = \frac{\frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}} = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

Οπότε

$$0 < \tan\left(\frac{\varphi}{2}\right) < \frac{1}{\sqrt{3}} \Rightarrow$$

$$0 < \text{APF}_{\text{rhombic}} < \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \Rightarrow$$

$$0 < \text{APF}_{\text{rhombic}} < \text{APF}_{\text{triangular}}$$

**Συμπέρασμα:** Από τα παραπάνω αποδεικνύεται ότι το πυκνότερο διδιάστατο πλέγμα είναι το

τριγωνικό με APF ίσο με  $\frac{\pi}{2\sqrt{3}} \approx 0.907$ .

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2<sup>ο</sup> : πρόγραμμα

### Πρόγραμμα `fortran` εντοπισμού γειτόνων οιασδήποτε τάξεως σε κάθε ένα εκ των πέντε διδιαστάτων πλεγμάτων Bravais

Σε αυτό το κεφάλαιο θα ασχοληθούμε με το πρόγραμμα, το οποίο παραθέτουμε πιο κάτω. Θα εξηγήσουμε τη λειτουργία του δηλαδή το πως υπολογίζουμε τον αριθμό αλλά και την απόσταση των γειτόνων οιασδήποτε τάξεως ενός πλεγματοκού σημείου, για όποιο πλέγμα και εάν έχουμε. Το πρόγραμμα δημιούργησε ο επιβλέπων καθηγητής Κωνσταντίνος Σιμσερίδης. Οι παραλλαγές του προγράμματος που περιγράφουν το κάθε είδος πλέγματος μπορούν να χρησιμοποιηθούν εφόσον γίνεται αναφορά στο πρωτότυπο. Το κάτωθι πρόγραμμα αποτελεί την παραλλαγή για το τετραγωνικό πλέγμα (square lattice).

```
program square

    implicit none

!   Declarations...
    integer upto, dimk
    parameter (upto=18, dimk=8)

    integer k1, k2, i, j, l, sum, newsum, metrisis, nos, metrima
    integer count(upto)
    real*8 mikro, step
    real*8 distance, D
    real*8 r(upto)
    real*8 a(2,2)
    real*8 ar(-dimk:dimk, -dimk:dimk, 2)
    real*8 arn(-dimk:dimk, -dimk:dimk)
    real*8 arn2(-dimk:dimk, -dimk:dimk)

!   Executable Statements...
!   Here I take lattice parameter = 1
    nos=(2*dimk+1)**2 ! number of lattice sites
    mikro=1.0d-6
```

```

do l=1,uptonn
count(l)=0
enddo

write(*,*) 'distances of neighbors given by r(l) i.e. uptonn'
D=1.0d0
write(*,1212) D
1212 format('diameter of hard circles,
& D = lattice parameter (taken 1 here) = ',f12.5)
do l=1,uptonn
if (l.le.2) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l))
endif
if ((l.gt.2).and.(l.le.4)) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+1))
endif
if ((l.gt.4).and.(l.le.7)) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+3))
endif
if (l.eq.8) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+5))
endif
if ((l.gt.8).and.(l.le.11)) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+7))
endif
if (l.eq.12) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+8))
endif
if (l.eq.13) then
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+12))
endif
r(14)=D*dsqrt(dfloat(26))
r(15)=D*dsqrt(dfloat(29))
r(16)=D*dsqrt(dfloat(32))
r(17)=D*dsqrt(dfloat(34))

```



```

r(18)=D*dsqrt(dfloat(36))

write(*,1313) l,r(1)
1313 format('r(',i2,')=',f12.5)
enddo

open(unit=1,file="primitive_vectors_square")
write(1,*) 'square lattice'
write(1,*) 'primitive vectors a(i,j) i:component j:vector'
do j=1,2
write(1,*) 'j:vector ', j
do i=1,2
if (j.eq.i) then
a(i,j)=1.0d0
else
a(i,j)=0.0d0
endif
write(1,1) i,j,i,j,a(i,j)
enddo
enddo
1 format('i=',i1,2x,'j=',i1,2x,'a(',i1,',',i1,')=',f20.16)
close(unit=1)

do k1=-dimk,dimk; do k2=-dimk,dimk
do i=1,2
ar(k1,k2,i)=0.0d0
enddo
enddo; enddo

open(unit=33,file="ar_square")
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
write(33,*) 'k1,k2',k1,k2
do i=1,2
ar(k1,k2,i)=k1*a(i,1)+k2*a(i,2)

```

```

write(33,*) 'i', i, ar(k1,k2,i)
enddo
write(44,*) ar(k1,k2,1),ar(k1,k2,2) ! to draw
enddo
enddo
close(unit=33)

```

```

open(unit=4,file="arn2+arn_square")
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
write(4,*) 'k1,k2',k1,k2
arn2(k1,k2)=ar(k1,k2,1)**2+ar(k1,k2,2)**2
arn(k1,k2)=dsqrt(arn2(k1,k2))
write(4,*) 'arn2',arn2(k1,k2)
write(4,*) 'arn', arn(k1,k2)
enddo
enddo
close(unit=4)

```

```

open(unit=7,file="arn_uptonn_square")
write(7,*) 'arn given by r(l) i.e. uptonn for square lattice'
sum=0
do l=1,uptonn !!!
distance=r(l)
count(l)=0
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
if (abs(arn(k1,k2)-distance).lt.mikro) then
count(l)=count(l)+1
write(7,*) 'k1,k2,arn(k1,k2)', k1,k2,arn(k1,k2)
do i=1,2
write(7,7) k1,k2,i,ar(k1,k2,i)
7 format ('ar(',i3,',',i3,',',i1,')=',f20.16)
enddo
write(100+l,*) ar(k1,k2,1),ar(k1,k2,2),arn(k1,k2) ! to draw

```

```

endif
enddo
enddo
sum=sum+count(1)
write(7,77) 1,count(1)
write(*,77) 1,count(1)
77  format('count(',i2,')=',i3)
write(7,*) '      '
enddo !!!
write(7,777) sum
write(*,777) sum
777  format('sum=',i4)
write(*,*) ''
write(*,*) 'Already described sum=',sum
close(unit=7)

metrisis=0
distance=r(uptonn)
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
if (arn(k1,k2).gt.(distance+mikro)) then
metrisis=metrisis+1
endif
enddo
enddo
write(*,*) 'Rest          metrisis=', metrisis
write(*,*) ''
write(*,*) 'Origin          ', 1
write(*,*) ''
write(*,*) '          number of sites=', nos
write(*,*) ''
if (1+sum+metrisis.ne.nos) then
write(*,*) '1+sum+metrisis.ne.nos'
else
write(*,*) 'Summations are correct!'

```

```

endif
write(*,*) ''

open(unit=9,file="arn_inside_investigation_shell_square")
write(9,*) 'arn_inside_investigation_shell_square'
write(*,*) 'arn_inside_investigation_shell_square'
metrima=0
step=0.3d0
distance=r(uptonn)+mikro
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
if ((arn(k1,k2).gt.distance).and.
& (arn(k1,k2).lt.(distance+step))) then
write(9,*) 'k1,k2,arn(k1,k2) ',k1,k2,arn(k1,k2)
metrima=metrima+1
endif
enddo
enddo
write(*,*) 'metrima=', metrima
close(unit=9)

```

end

## Σχολιασμός του προγράμματος

Στην αρχή δηλώνουμε το όνομα του προγράμματος με την εντολή `program square`. Η εντολή `implicit none` μας υποχρεώνει να δηλώσουμε όλες τις σταθερές, μεταβλητές και παραμέτρους του προγράμματος, πράγμα που εξασφαλίζει πληρέστερο έλεγχο του.

Κατόπιν μετά τη γραμμή σχόλιο

```
!   Declarations...
```

δηλώνουμε όλες τις παραμέτρους, σταθερές και μεταβλητές τις οποίες θα χρησιμοποιήσουμε στο πρόγραμμά μας. Πρώτα δηλώνονται οι παράμετροι με τις γραμμές

```
integer uptoNn,dimk  
parameter (uptoNn=18,dimk=8)
```

Το `uptoNn` μας δείχνει την τάξη των γειτόνων μέχρι τους οποίους έχουμε διερευνήσει το πλέγμα, δηλαδή μέχρι εκεί όπου γνωρίζουμε ήδη τον αριθμό και την απόσταση των γειτόνων είτε από τη θεωρία είτε από τα μέχρι εκείνη τη στιγμή τρεξίματα του προγράμματος. Το `dimk` δείχνει τις τιμές που παίρνουν οι ακέραιοι στην εξίσωση (1), συγκεκριμένα παίρνουν τις τιμές  $[-dimk, -dimk+1, \dots, dimk-1, dimk]$ . Επομένως, ο αριθμός των πλεγματικών σημείων είναι  $nos=(2*dimk+1)**2$ . Έπειτα δηλώνουμε όλες τις υπόλοιπες σταθερές και μεταβλητές:

```
integer k1,k2,i,j,l,sum,newsum,metrasis,nos,metrima
```

είναι διάφορες ακέραιες σταθερές.

```
integer count(uptoNn)
```

μετρά τον αριθμό των  $l$  τάξεως γειτόνων.

```
real*8 mikro,step  
real*8 distance,D
```

είναι πραγματικές σταθερές των οποίων η σημασία θα φανεί παρακάτω.

```
real*8 r(uptoNn)
```

είναι οι αποστάσεις των ήδη διερευνημένων γειτόνων.

```
real*8 a(2,2)
```

είναι τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως.

```
real*8 ar(-dimk:dimk,-dimk:dimk,2)  
real*8 arn(-dimk:dimk,-dimk:dimk)  
real*8 arn2(-dimk:dimk,-dimk:dimk)
```

είναι το διάνυσμα θέσεως του πλεγματικού σημείου, το μέτρο του και το τετράγωνο του μέτρου του, αντιστοίχως. Μετά με τη γραμμή σχόλιο

```
!   Executable Statements...
```

ξεκινούν οι εκτελέσιμες προτάσεις του προγράμματος.

Στο τετραγωνικό πλέγμα λαμβάνουμε την πλευρά του τετραγώνου ή πλεγματική σταθερά ως μονάδα μετρήσεως, πράγμα που δηλώνεται στη γραμμή σχόλιο

```
! Here I take lattice parameter = 1
```

Ακολουθεί ο αριθμός των πλεγματικών σημείων που είναι βεβαίως

```
nos=(2*dimk+1)**2 ! number of lattice sites
```

Ακόμα ορίζουμε μια μικρή ποσότητα π.χ.

```
mikro=1.0d-6
```

Έπειτα, μηδενίζουμε το μετρητή μας με τις εντολές

```
do l=1,uptonn
```

```
count(l)=0
```

```
enddo
```

για να είναι σίγουρο ότι ξεκινάμε την αρίθμηση εξ αρχής.

Στο κομμάτι

```
write(*,*) 'distances of neighbors given by r(l) i.e. uptonn'
```

```
D=1.0d0
```

```
write(*,1212) D
```

1212 format('diameter of hard circles,

```
& D = lattice parameter (taken 1 here) = ',f12.5)
```

Επειδή εδώ έχουμε τετραγωνικό πλέγμα θεωρούμε  $D = a = 1$  δηλαδή οι αποστάσεις μετρώνται σε πλεγματικές σταθερές. Στο κομμάτι

```
do l=1,uptonn
```

```
if (l.le.2) then
```

```
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l))
```

```
endif
```

```
if ((l.gt.2).and.(l.le.4)) then
```

```
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+1))
```

```
endif
```

```
if ((l.gt.4).and.(l.le.7)) then
```

```
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+3))
```

```
endif
```

```
if (l.eq.8) then
```

```
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+5))
```

```
endif
```

```
if ((l.gt.8).and.(l.le.11)) then
```

```
r(l)=D*dsqrt(dfloat(l+7))
```

```

endif
if (l.eq.12) then
r(1)=D*dsqrt(dfloat(l+8))
endif
if (l.eq.13) then
r(1)=D*dsqrt(dfloat(l+12))
endif
r(14)=D*dsqrt(dfloat(26))
r(15)=D*dsqrt(dfloat(29))
r(16)=D*dsqrt(dfloat(32))
r(17)=D*dsqrt(dfloat(34))
r(18)=D*dsqrt(dfloat(36))

write(*,1313) l,r(1)
1313 format('r(',i2,',')=',f12.5)
enddo

```

ορίζουμε τις αποστάσεις  $r(l)$  των  $l$  τάξεως γειτόνων που γνωρίζουμε ήδη είτε από τη θεωρία είτε από προηγούμενα τρεξίματα του προγράμματος. Κατόπιν τις τυπώνουμε στην οθόνη.

Στη συνέχεια στο κομμάτι

```

open(unit=1,file="primitive_vectors_square")
write(1,*) 'square lattice'
write(1,*) 'primitive vectors a(i,j) i:component j:vector'
do j=1,2
write(1,*) 'j:vector ', j
do i=1,2
if (j.eq.i) then
a(i,j)=1.0d0
else
a(i,j)=0.0d0
endif
write(1,1) i,j,i,j,a(i,j)
enddo
enddo
1 format('i=',i1,2x,'j=',i1,2x,'a(',i1,',',i1,')=',f20.16)
close(unit=1)

```

ορίζονται τα ΘΑΜ του τετραγωνικού πλέγματος  $\mathbf{a}_1 = a \mathbf{i}$  και  $\mathbf{a}_2 = a \mathbf{j}$ . Το κομμάτι αυτό του προγράμματος μεταβάλλεται όταν διερευνούμε άλλο πλέγμα. Συνέχεια μηδενίζουμε τα διανύσματα θέσεως των πλεγματικών σημείων για να είμαστε σίγουροι ότι τα αντιμετωπίζουμε εξ αρχής

```
do k1=-dimk,dimk; do k2=-dimk,dimk
  do i=1,2
    ar(k1,k2,i)=0.0d0
  enddo
enddo; enddo
```

και έπειτα τα ορίζουμε σύμφωνα με τη σχέση (1) όπου βέβαια αφού έχουμε διδιάστατο πλέγμα χρειάζονται μόνο δύο ΘΑΜ  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  και δύο ακέραιοι  $n_1, n_2$  οι οποίοι στο πρόγραμμα ονομάζονται  $k_1, k_2$ .

```
open(unit=33, file="ar_square")
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
write(33, *) 'k1,k2', k1, k2
do i=1,2
ar(k1,k2,i)=k1*a(i,1)+k2*a(i,2)
write(33, *) 'i', i, ar(k1,k2,i)
enddo
write(44, *) ar(k1,k2,1), ar(k1,k2,2) ! to draw
enddo
enddo
close(unit=33)
```

Κατόπιν στο κομμάτι

```
open(unit=4, file="arn2+arn_square")
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
write(4, *) 'k1,k2', k1, k2
arn2(k1,k2)=ar(k1,k2,1)**2+ar(k1,k2,2)**2
arn(k1,k2)=dsqrt(arn2(k1,k2))
write(4, *) 'arn2', arn2(k1,k2)
write(4, *) 'arn', arn(k1,k2)
enddo
enddo
close(unit=4)
```



ορίζονται τα μέτρα των διανυσμάτων θέσεως των πλεγματικών σημείων και τα τετράγωνα τους. Μετά αναζητούμε γείτονες σε απόσταση  $distance=r(l)$ . Η αναζήτηση γίνεται μέσω της διαφοράς  $abs(arn(k1,k2)-distance)$  για να αποφευχθεί η επίδραση αριθμητικών μικροδιαφορών. Επειδή η πλεγματική σταθερά είναι 1.0 το `mikro` είναι πράγματι πολύ μικρό. Το πλήθος των γειτόνων σε απόσταση  $r(l)$  καταγράφεται στο `count(l)`.

```

open(unit=7,file="arn_uptonn_square")
write(7,*) 'arn given by r(l) i.e. uptonn for square lattice'
sum=0
do l=1,uptonn !!!
distance=r(l)
count(l)=0
do k1=-dimk,dimk
do k2=-dimk,dimk
if (abs(arn(k1,k2)-distance).lt.mikro) then
count(l)=count(l)+1
write(7,*) 'k1,k2,arn(k1,k2)', k1,k2,arn(k1,k2)
do i=1,2
write(7,7) k1,k2,i,ar(k1,k2,i)
7 format ('ar(',i3,',',i3,',',i1,')=',f20.16)
enddo
write(100+l,*) ar(k1,k2,1),ar(k1,k2,2),arn(k1,k2) ! to draw
endif
enddo
enddo
sum=sum+count(l)
write(7,77) l,count(l)
write(*,77) l,count(l)
77 format('count(',i2,')=',i3)
write(7,*) '      '
enddo !!!
write(7,777) sum
write(*,777) sum
777 format('sum=',i4)
write(*,*) ''
write(*,*) 'Already described sum=',sum

```

```
close(unit=7)
```

Έτσι

l = 1           είναι οι πρώτοι γείτονες

l = 2           είναι οι δεύτεροι γείτονες

l = 3           είναι οι τρίτοι γείτονες

κ. ο. κ

Στο κομμάτι

```
metrisis=0
  distance=r(uptonn)
  do k1=-dimk,dimk
  do k2=-dimk,dimk
  if (arn(k1,k2).gt.(distance+mikro)) then
metrisis=metrisis+1
  endif
  enddo
  enddo
write(*,*) 'Rest           metrisis=', metrisis
write(*,*) ''
write(*,*) 'Origin                   ', 1
write(*,*) ''
write(*,*) '           number of sites=', nos
write(*,*) ''
if (1+sum+metrisis.ne.nos) then
write(*,*) '1+sum+metrisis.ne.nos'
else
write(*,*) 'Summations are correct!'
endif
write(*,*) ''
```

μετράμε τα πλεγματικά σημεία που δεν αντιστοιχούν σε ήδη καταγεγραμμένους-κατηγοριοποιημένους σε τάξη γείτονες. Το πλήθος τους αποθηκεύεται στο `metrisis`. Μετά ελέγχουμε αν το πλεγματικό σημείο του οποίου ψάχνουμε τους γείτονες μαζί με τους ήδη γνωστούς-κατηγοριοποιημένους σε τάξη γείτονες και τους μη ακόμα καταγεγραμμένους-κατηγοριοποιημένους σε τάξη γείτονες μας κάνει τον συνολικό αριθμό των πλεγματικών σημείων που δημιουργήσαμε στην αρχή. Αν ναι, τυπώνεται στην οθόνη το καθησυχαστικό μήνυμα 'Summations are correct!'.

Μετά ψάχνουμε τους αμέσως επόμενους από τους ήδη καταγεγραμμένους- κατηγοριοποιημένους σε τάξη γείτονες οι οποίοι βρίσκονται σε ένα φλοιό αμέσως μετά τη σφαίρα των ήδη καταγεγραμμένων-κατηγοριοποιημένων σε τάξη γείτονες. Το εύρος του φλοιού καθορίζεται από τη μεταβλητή `step`. Αν αυτή είναι πολύ μεγάλη, τότε καταγράφονται πολλών τάξεων επόμενοι γείτονες, αν είναι αρκετά μικρή μόνο μίας τάξεως επόμενοι γείτονες.

```
open(unit=9, file="arn_inside_investigation_shell_square")
write(9, *) 'arn_inside_investigation_shell_square'
write(*, *) 'arn_inside_investigation_shell_square'
metrima=0
step=0.3d0
distance=r(uptonn)+mikro
do k1=-dimk, dimk
do k2=-dimk, dimk
if ((arn(k1, k2).gt.distance).and.
& (arn(k1, k2).lt.(distance+step))) then
write(9, *) 'k1, k2, arn(k1, k2) ', k1, k2, arn(k1, k2)
metrima=metrima+1
endif
enddo
enddo
write(*, *) 'metrima=', metrima
close(unit=9)
```

Και τέλος το πρόγραμμα τελειώνει.

```
end
```

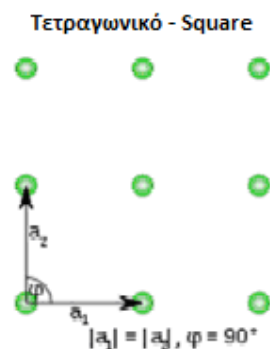
## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3ο :

### Συμπεράσματα και διαγράμματα για κάθε ένα από τα πέντε πλέγματα Bravais

Για κάθε ένα από τα πέντε πλέγματα Bravais, παρατίθεται το κομμάτι του προγράμματος όπου ορίζουμε τα θεμελιώδη διανύσματα μετατοπίσεως με τη βοήθεια των οποίων συνθέτουμε το πλέγμα. Έπειτα χρησιμοποιούμε τα αποτελέσματα του προγράμματος, παίρνουμε δηλαδή τις αποστάσεις και τον πληθυσμό των κάθε τάξεως γειτόνων και τα παρουσιάζουμε σε διαγράμματα.

#### Τετραγωνικό πλέγμα (square lattice)

Το τετραγωνικό πλέγμα λαμβάνεται όταν  $\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2$  και  $\varphi = 90^\circ$ . Μια εικόνα του φαίνεται δίπλα. Για αυτό το πλέγμα, όπως έχουμε αναφέρει και στο πρώτο κεφάλαιο, τα δύο θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως (ΘΑΜ)  $\mathbf{a}_1$  και  $\mathbf{a}_2$  έχουν ίσο μέτρο και η μεταξύ τους γωνία είναι  $90^\circ$ . Αυτό το έχουμε γράψει στο πρόγραμμα εκεί όπου ορίζουμε τα ΘΑΜ. Παραθέτουμε αμέσως μετά το σχετικό κομμάτι του προγράμματος. Έχουμε ορίσει δυο ΘΑΜ, από τα οποία το ένα έχει μόνο x συνιστώσα ενώ το άλλο μόνο y συνιστώσα.



**Εικόνα 8.** Το τετραγωνικό πλέγμα (square lattice).

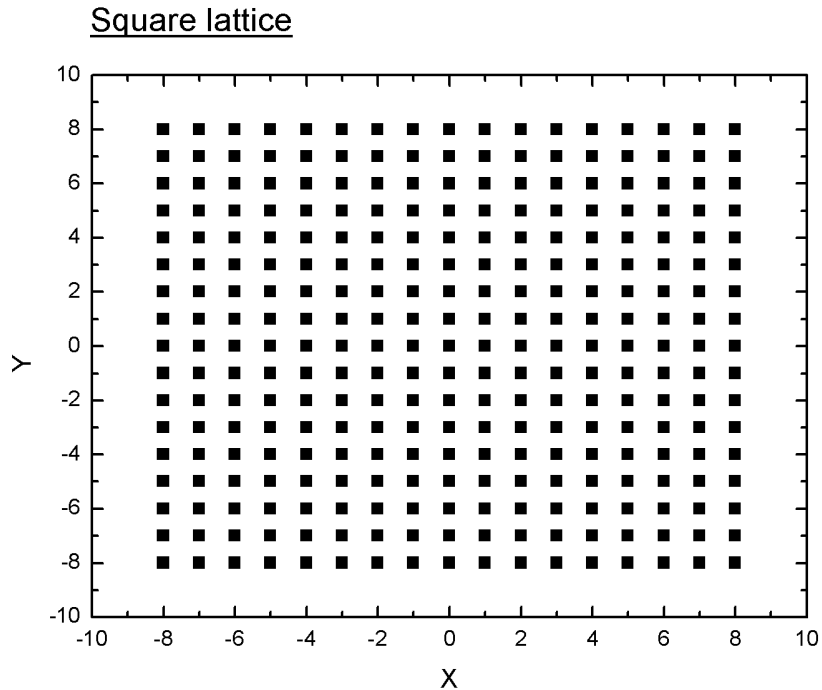
```
open(unit=1, file="primitive_vectors_square")
  write(1, *) 'square lattice'
  write(1, *) 'primitive vectors a(i,j) i:component j:vector'
  do j=1,2
    write(1, *) 'j:vector ', j
    do i=1,2
      if (j.eq.i) then
        a(i,j)=1.0d0
      else
        a(i,j)=0.0d0
      endif
    write(1,1) i,j,i,j,a(i,j)
  enddo
enddo
```

```
format('i=', i1, 2x, 'j=', i1, 2x, 'a(', i1, ', ', i1, ')=', f20.16)
close(unit=1)
```

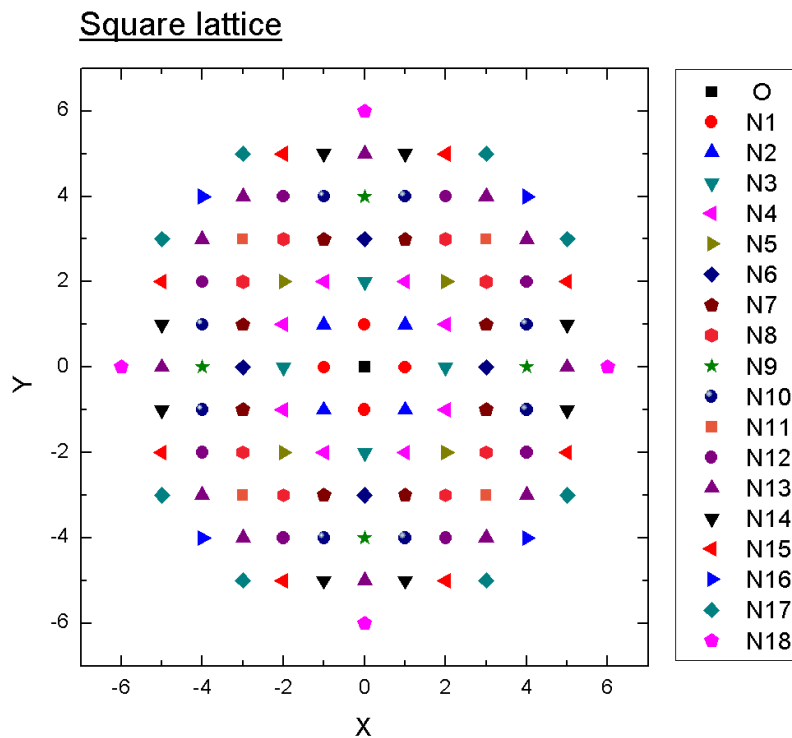
Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζουμε τα αποτελέσματά μας για τον αριθμό των γειτόνων κάθε τάξεως ενός πλεγματοειδούς σημείου καθώς και την απόστασή τους από το πλεγματοειδές σημείο.

ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΤΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ
1 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{1} \approx 1.00000$
2 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{2} \approx 1.41421$
3 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{4} \approx 2.00000$
4 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{5} \approx 2.23607$
5 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{8} \approx 2.82843$
6 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{9} \approx 3.00000$
7 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{10} \approx 3.16228$
8 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{13} \approx 3.60555$
9 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{16} \approx 4.00000$
10 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{17} \approx 4.12311$
11 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{18} \approx 4.24264$
12 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{20} \approx 4.47214$
13 <sup>ος</sup>	12	$\sqrt{25} \approx 5.00000$
14 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{26} \approx 5.09902$
15 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{29} \approx 5.38516$
16 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{32} \approx 5.65685$
17 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{34} \approx 5.83095$
18 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{36} \approx 6.00000$

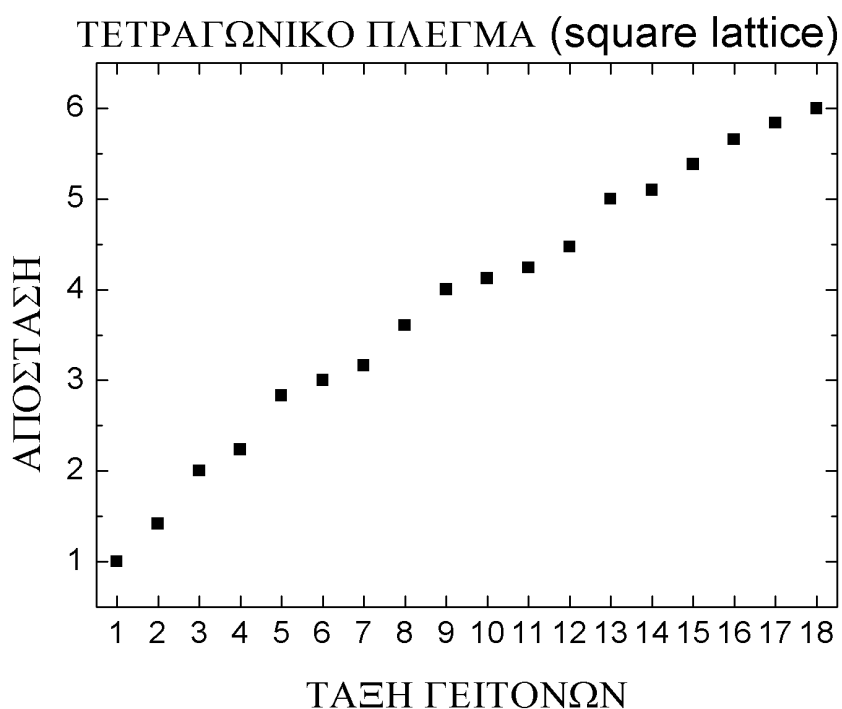
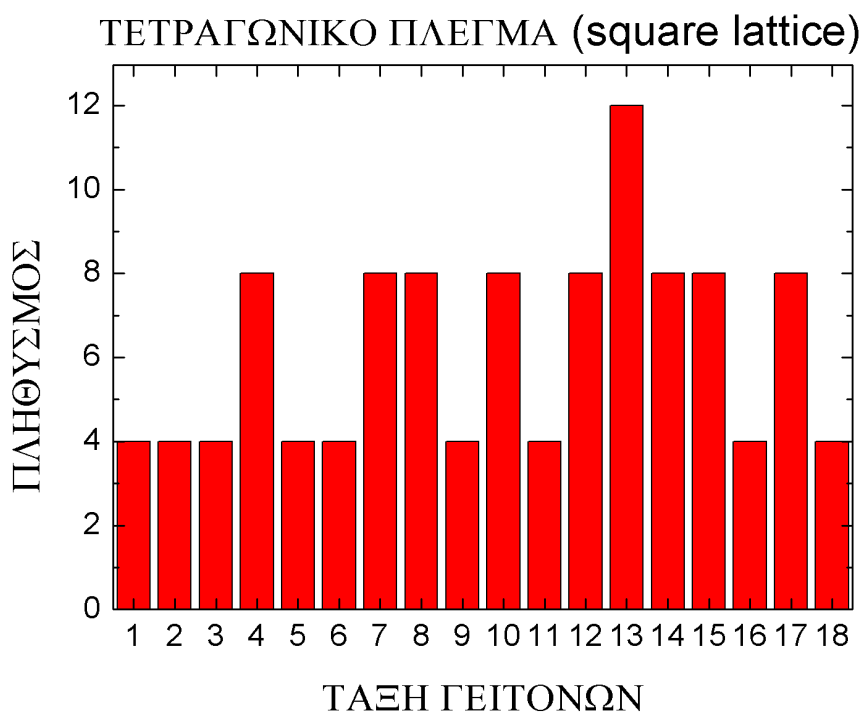
Με βάση αυτά τα αποτελέσματα, τα οποία παίρνουμε από το πρόγραμμά μας, σχεδιάζουμε γενικά το τετραγωνικό πλέγμα, αλλά και ειδικά τη διάταξη των μέχρι 18<sup>ης</sup> τάξεως γειτόνων ενός πλεγματοειδούς σημείου. Έτσι έχουμε τα παρακάτω διαγράμματα:



**Εικόνα 9.** Γενική άποψη του τετραγωνικού πλέγματος (square lattice).



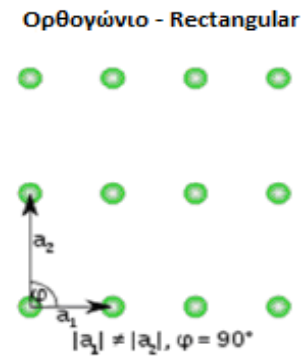
**Εικόνα 10.** Η διάταξη των έως 18<sup>ης</sup> τάξεως γειτόνων γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση  $(0,0)$  δηλαδή γύρω από το μαύρο τετραγωνάκι στο κέντρο του διαγράμματος.



**Εικόνα 11.** Τετραγωνικό πλέγμα. Για κάθε τάξη γειτόνων παρουσιάζεται ο αριθμός τους (άνω) και η απόστασή τους από το πλεγματικό σημείο (κάτω). θεωρούμε την πλευρά του τετραγώνου ή πλεγματική σταθερά  $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = D = 1$ . Παρατηρούμε ότι ο αριθμός των γειτόνων οιασδήποτε τάξεως είναι πολλαπλάσιο του 4.

### Ορθογωνικό πλέγμα (rectangular lattice)

Στο ορθογωνικό πλέγμα  $|\mathbf{a}_1| \neq |\mathbf{a}_2|$  και  $\varphi = 90^\circ$ . Μια αναπαράστασή του φαίνεται στη διπλανή εικόνα. Στο ορθογωνικό πλέγμα πάλι τα δύο θεμελιώδη διανύσματα μετατοπίσεως  $\mathbf{a}_1$  και  $\mathbf{a}_2$  είναι κάθετα μεταξύ τους άρα  $\varphi = 90^\circ$ , όμως τα μέτρα αυτών των διανυσμάτων είναι άνισα. Το ορθογωνικό πλέγμα μεταβάλλεται αλλάζοντας το λόγο  $\lambda = |\mathbf{a}_1| / |\mathbf{a}_2| = a / b$ . Ο λόγος αυτός καλείται **ar**b**** στο πρόγραμμα, ενώ θέτουμε  $b = 1$ ,



**Εικόνα 12.** Το ορθογωνικό πλέγμα (rectangular lattice).

οπότε  $a = \lambda$ . Τα χαρακτηριστικά των ΘΑΜ έχουν μεταφερθεί στο πρόγραμμα όπως φαίνεται παρακάτω:

```
open(unit=1,file="primitive_vectors_rectangular")
  write(1,*) 'rectangular lattice'
  write(1,*) 'primitive vectors a(i,j) i:component j:vector'
  a(1,1)=apb
  a(2,1)=0.0d0
  a(1,2)=0.0d0
  a(2,2)=1.0d0
  do j=1,2
  do i=1,2
  write(1,1) i,j,i,j,a(i,j)
  enddo
  enddo
  format('i=',i1,2x,'j=',i1,2x,'a(',i1,',',i1,')=',f20.16)
close(unit=1)
```

Επειδή  $b < a$  συνεπάγεται ότι  $D = b$  που το θέτουμε ίσο με 1, δηλαδή μετράμε τις αποστάσεις με μονάδα μετρήσεως το  $b$ . Αυτό δηλώνεται στο πρόγραμμα ως

```
  write(*,*) 'distances of neighbors given by r(1) i.e. upto n'
  D=1.0d0
  write(*,1212) D
1212 format('diameter of hard circles,
& D = b (taken 1 here) = ',f12.5)
```

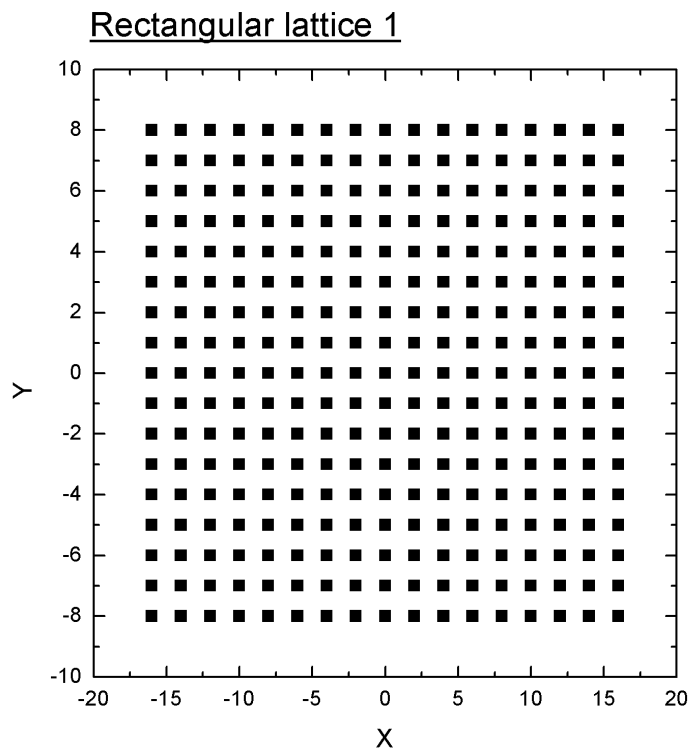
ΠΡΩΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ



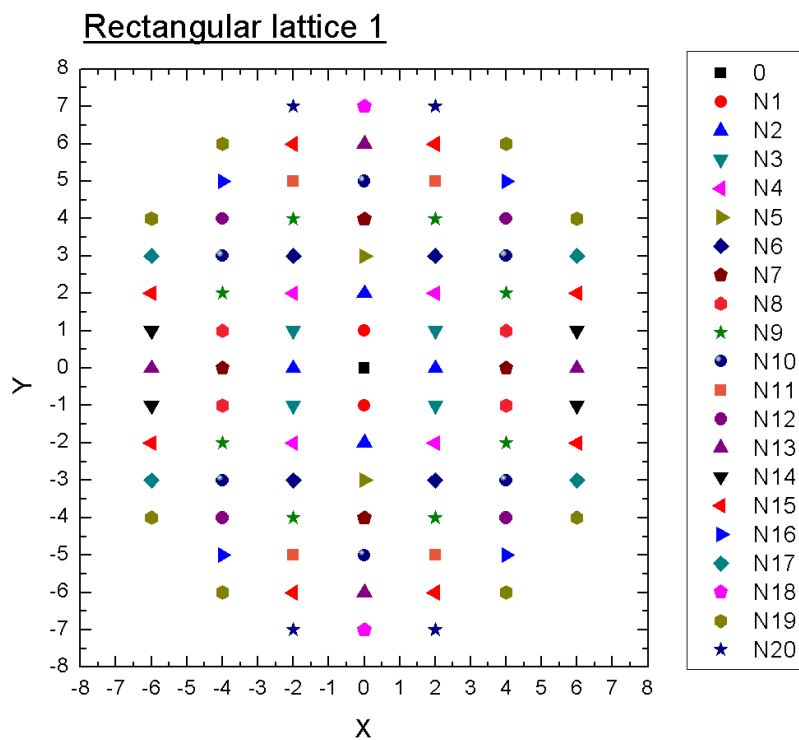
Ας θεωρήσουμε στην πρώτη αυτή περίπτωση ότι  $arb=2 \cdot \theta d\theta$ , δηλαδή το  $|a_1|$  διπλάσιο του  $|a_2|$ . Επομένως, κάποιες αποστάσεις εκφυλίζονται. Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζουμε τα αποτελέσματά μας για τον αριθμό των γειτόνων κάθε τάξεως ενός πλεγματοειδούς σημείου καθώς και την απόστασή τους από το πλεγματοειδές σημείο.

ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΤΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ
1 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{1} \approx 1.00000$
2 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{4} \approx 2.00000$
3 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{5} \approx 2.23607$
4 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{8} \approx 2.82843$
5 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{9} \approx 3.00000$
6 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{13} \approx 3.60555$
7 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{16} \approx 4.00000$
8 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{17} \approx 4.12311$
9 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{20} \approx 4.47214$
10 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{25} \approx 5.00000$
11 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{29} \approx 5.38516$
12 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{32} \approx 5.65685$
13 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{36} \approx 6.00000$
14 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{37} \approx 6.08276$
15 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{40} \approx 6.32456$
16 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{41} \approx 6.40312$
17 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{45} \approx 6.70820$
18 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{49} \approx 7.00000$
19 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{52} \approx 7.21110$
20 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{53} \approx 7.28011$

Μετά σχεδιάζουμε γενικά το ορθογωνικό πλέγμα, αλλά και ειδικά τη διάταξη των μέχρι 20<sup>ος</sup> τάξεως γειτόνων ενός πλεγματοειδούς σημείου. Έτσι έχουμε τα παρακάτω διαγράμματα:

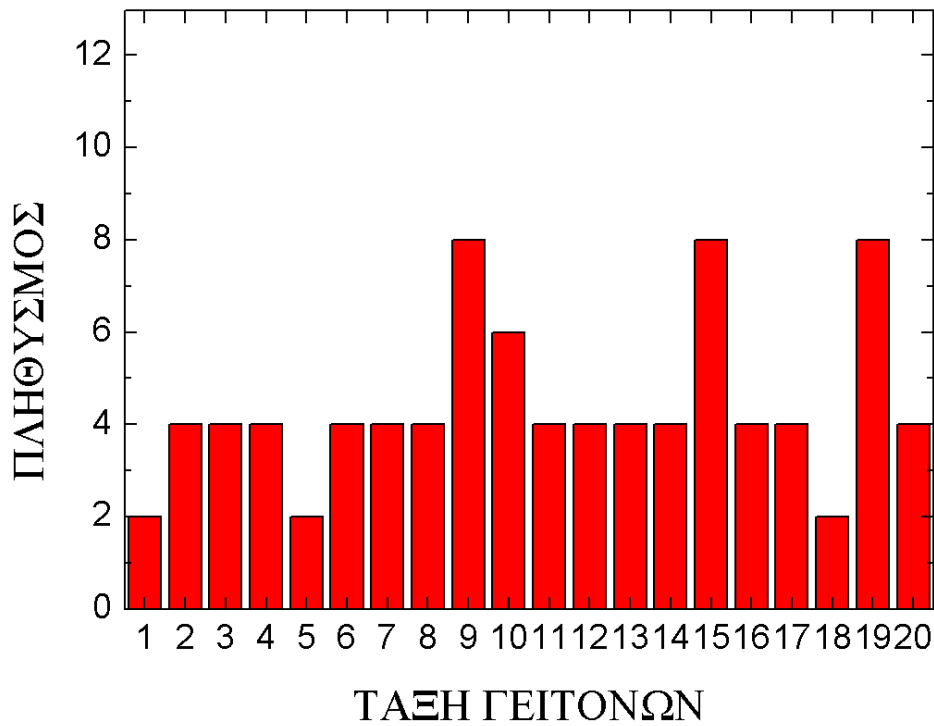


Εικόνα 13. Γενική άποψη του ορθογωνικού πλέγματος 1 (rectangular lattice 1).

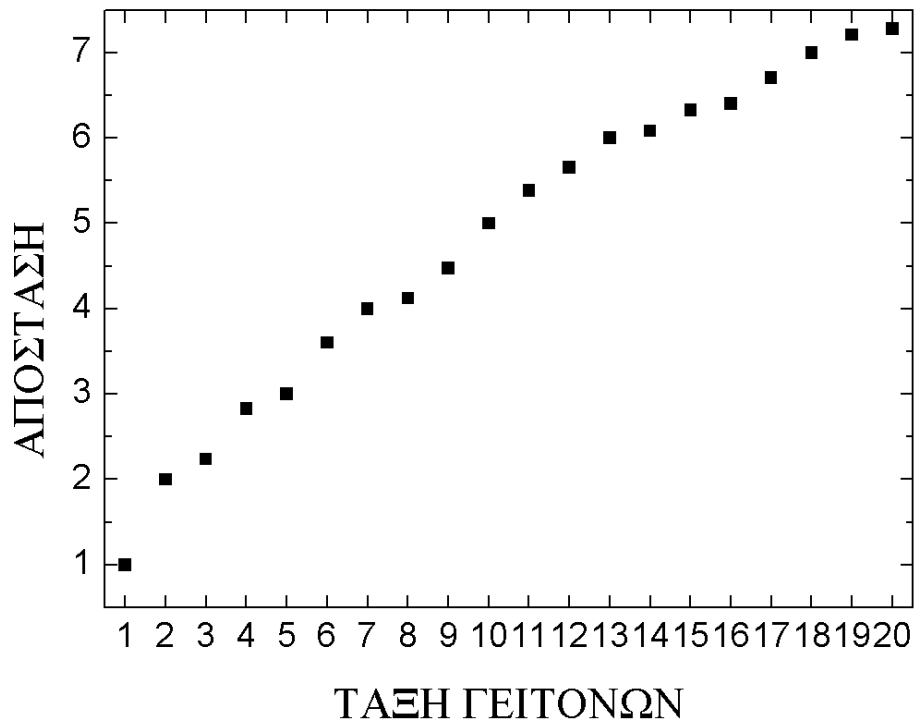


Εικόνα 14. Στο ορθογωνικό πλέγμα 1, η διάταξη των έως 20<sup>ης</sup> τάξεως γειτόνων γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση  $(0,0)$  δηλαδή γύρω από το μαύρο τετραγωνάκι στο κέντρο του διαγράμματος.

### ΟΡΘΟΓΩΝΙΚΟ ΠΛΕΓΜΑ 1 (rectangular lattice 1)



### ΟΡΘΟΓΩΝΙΚΟ ΠΛΕΓΜΑ 1 (rectangular lattice 1)



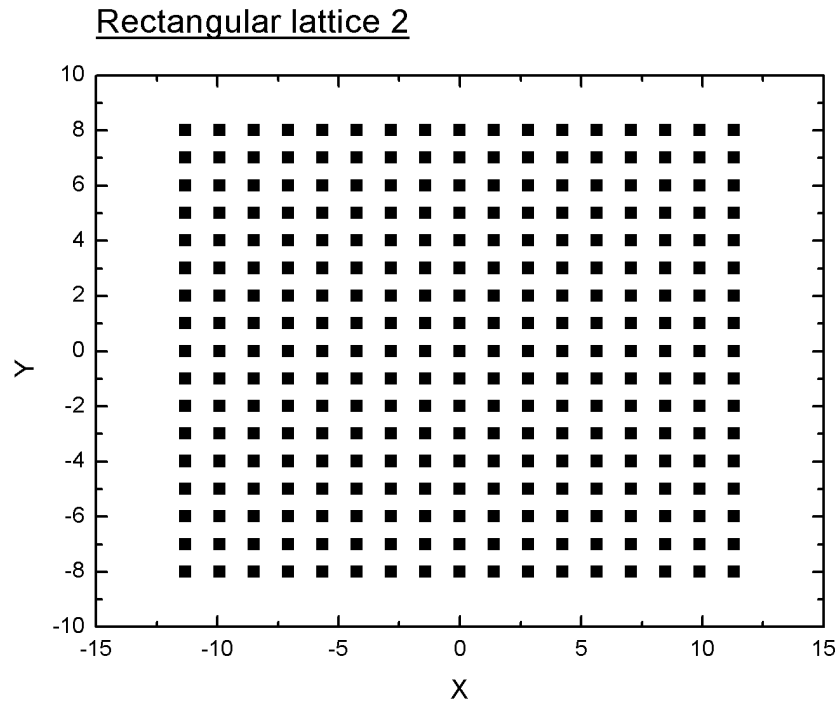
**Εικόνα 15.** Ορθογωνικό πλέγμα 1. Για κάθε τάξη γειτόνων παρουσιάζεται ο αριθμός τους (άνω) και η απόστασή τους από το πλεγματικό σημείο (κάτω).

### ΔΕΥΤΕΡΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

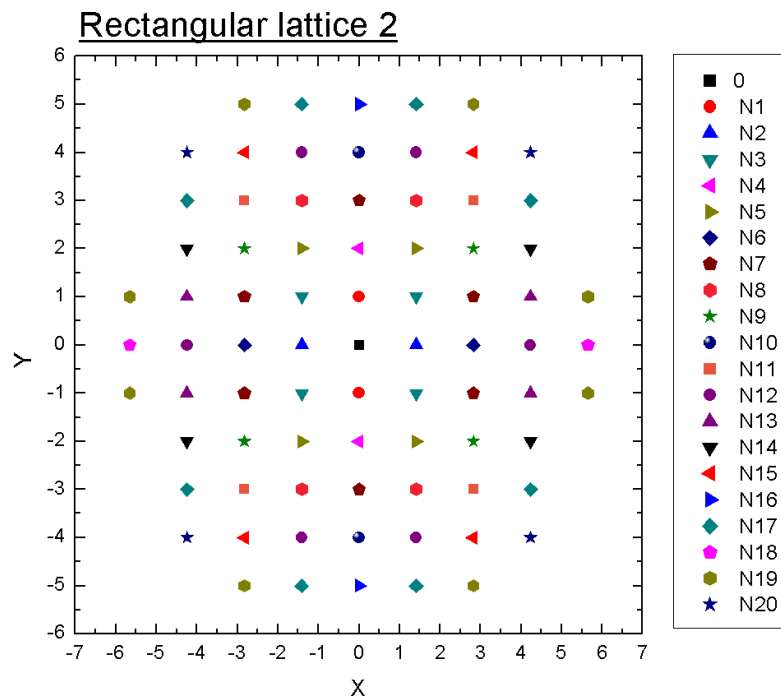
Στην επόμενη δεύτερη περίπτωση θα θεωρήσουμε ότι  $apb = dsqrt(2 \cdot \theta d\theta)$ , δηλαδή  $|a_1| = \sqrt{2}|a_2|$ . Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζουμε τα αποτελέσματά μας για τον αριθμό των γειτόνων κάθε τάξεως ενός πλεγματοειδούς σημείου καθώς και την απόστασή τους από το πλεγματοειδές σημείο.

ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΤΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ
1 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{1} \approx 1.00000$
2 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{2} \approx 1.41421$
3 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{3} \approx 1.73205$
4 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{4} \approx 2.00000$
5 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{6} \approx 2.44949$
6 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{8} \approx 2.82843$
7 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{9} \approx 3.00000$
8 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{11} \approx 3.31662$
9 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{12} \approx 3.46410$
10 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{16} \approx 4.00000$
11 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{17} \approx 4.12311$
12 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{18} \approx 4.24264$
13 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{19} \approx 4.35890$
14 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{22} \approx 4.69042$
15 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{24} \approx 4.89898$
16 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{25} \approx 5.00000$
17 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{27} \approx 5.19615$
18 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{32} \approx 5.65685$
19 <sup>ος</sup>	8	$\sqrt{33} \approx 5.74456$
20 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{34} \approx 5.83095$

Σύμφωνα με τα παραπάνω αποτελέσματα εξάγουμε τα παρακάτω διαγράμματα:

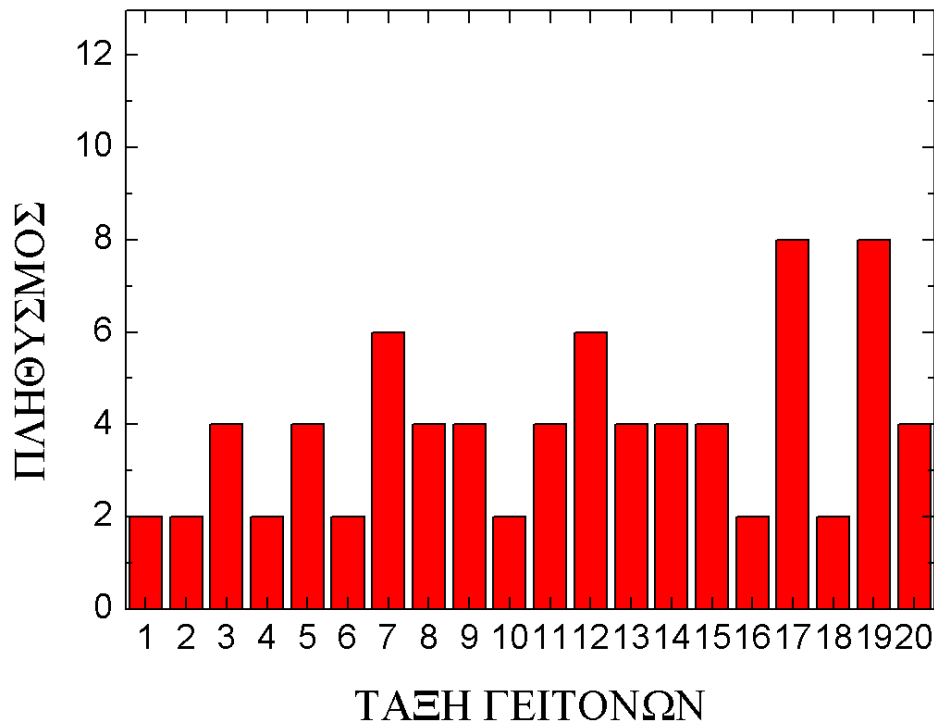


**Εικόνα 16.** Γενική άποψη του ορθογωνικού πλέγματος 2 (rectangular lattice 2).

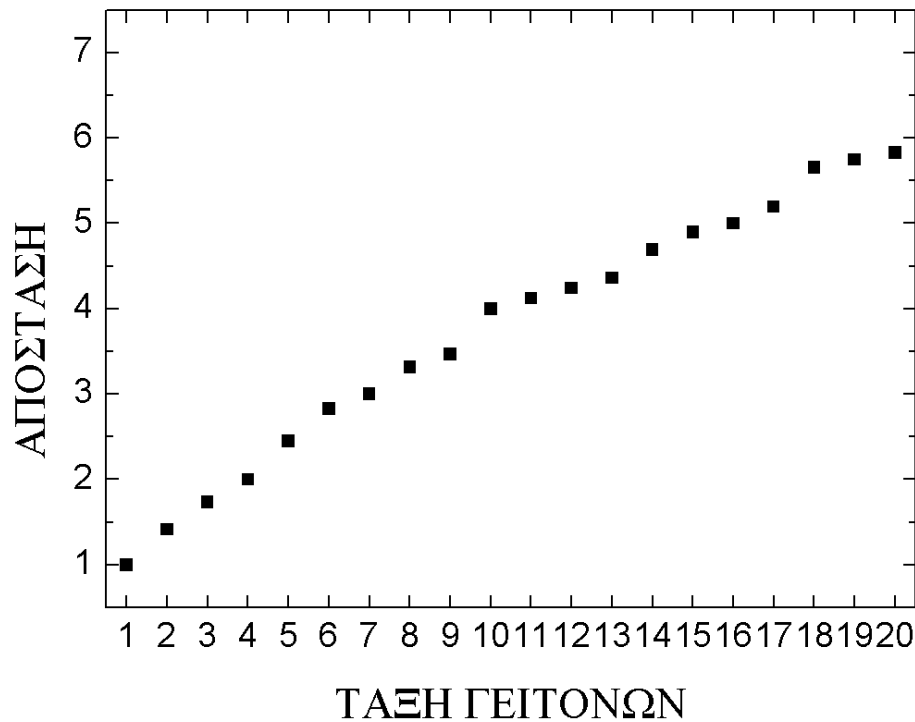


**Εικόνα 17.** Στο ορθογωνικό πλέγμα 2, η διάταξη των έως 20<sup>ης</sup> τάξεως γειτόνων γύρω από ένα πλεγματοικό σημείο που τοποθετείται στη θέση  $(0,0)$  δηλαδή γύρω από το μαύρο τετραγωνάκι στο κέντρο του διαγράμματος.

## ΟΡΘΟΓΩΝΙΚΟ ΠΛΕΓΜΑ 2 (rectangular lattice 2)



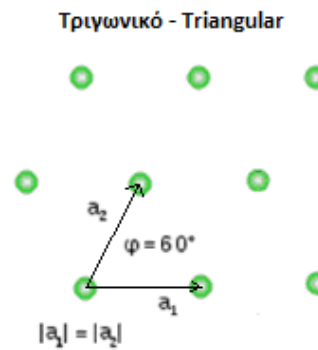
## ΟΡΘΟΓΩΝΙΚΟ ΠΛΕΓΜΑ 2 (rectangular lattice 2)



**Εικόνα 18.** Ορθογωνικό πλέγμα 2. Για κάθε τάξη γειτόνων παρουσιάζεται ο αριθμός τους (άνω) και η απόστασή τους από το πλεγματικό σημείο (κάτω).

## Τριγωνικό πλέγμα (triangular lattice)

Η διδιάστατη επιφάνεια μπορεί επίσης να γεμίσει με μια κανονική διάταξη ισοπλεύρων τριγώνων. Η μοναδιαία κυψελίδα τότε δίδεται από τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως με  $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$  και  $\varphi = 60^\circ$  ή  $\varphi = 120^\circ$ . Το τριγωνικό πλέγμα φαίνεται στη διπλανή εικόνα. Οπότε, η διάμετρος «σκληρών» κυκλικών δίσκων  $D = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$ , το οποίο θέτουμε ίσο με 1. Τα χαρακτηριστικά του έχουν μεταφερθεί στο πρόγραμμα ως εξής:



**Εικόνα 19.** Το τριγωνικό πλέγμα (triangular lattice).

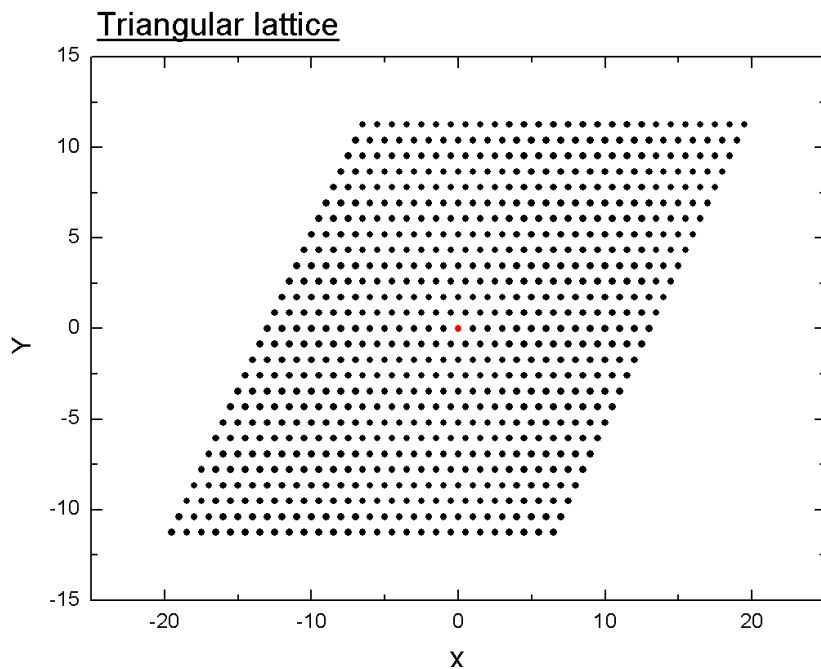
```
open(unit=1, file="primitive_vectors_triangular")
  write(1, *) 'triangular lattice'
  write(1, *) 'primitive vectors a(i,j) i:component j:vector'
  a(1,1)=1.0d0
  a(2,1)=0.0d0
  a(1,2)=0.5d0
  a(2,2)=dsqrt(3.0d0)/2.0d0
  do j=1,2
  do i=1,2
  write(1,1) i,j,i,j,a(i,j)
  enddo
  enddo
  format('i=',i1,2x,'j=',i1,2x,'a(',i1,',',i1,')=',f20.16)
close(unit=1)
```

Όπως μπορούμε να καταλάβουμε από το παραπάνω μέρος του προγράμματος έχουμε χρησιμοποιήσει το διάνυσμα  $\mathbf{a}_1$ , του οποίου οι συνιστώσες αντιπροσωπεύονται από τα  $a(1,1)$  και  $a(2,1)$ . Επειδή το  $\mathbf{a}_1$  είναι μόνο στον άξονα των x,  $a(2,1)=0$ . Το διάνυσμα  $\mathbf{a}_2$  αναλύεται στους άξονες x και y δηλαδή  $a_{2x} = \cos 60^\circ \cdot 1 = 0.5$  οπότε  $a(1,2)=0.5d0$  και  $a_{2y} = \sin 60^\circ \cdot 1$ , οπότε  $a(2,2)=dsqrt(3.0d0)/2.0d0$ . Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζουμε τα αποτελέσματά μας για τον αριθμό των γειτόνων κάθε τάξεως ενός πλεγματοειδούς σημείου καθώς και την απόστασή τους από το πλεγματοειδές σημείο.

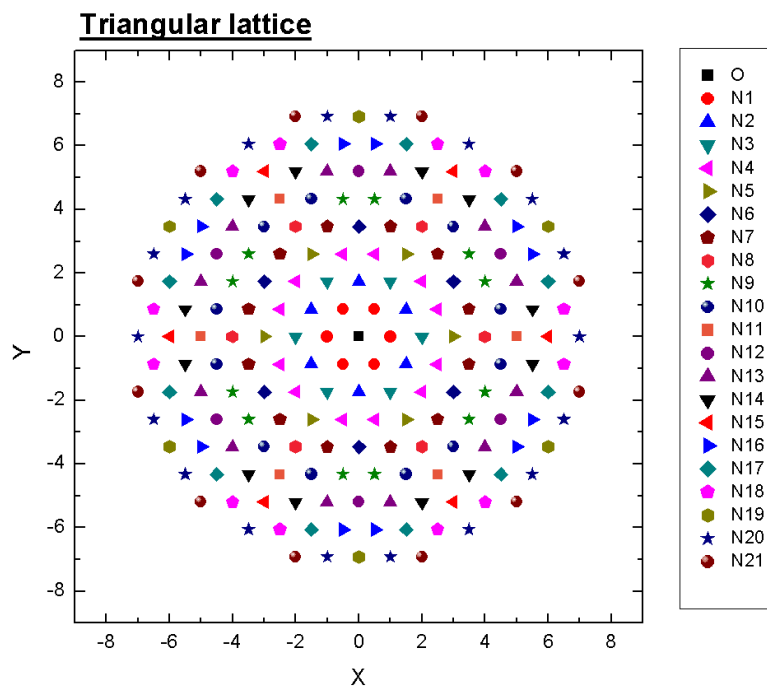
ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΤΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ
1 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{1} \approx 1.00000$
2 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{3} \approx 1.73205$
3 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{4} \approx 2.00000$
4 <sup>ος</sup>	12	$\sqrt{7} \approx 2.64575$
5 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{9} \approx 3.00000$
6 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{12} \approx 3.46410$
7 <sup>ος</sup>	12	$\sqrt{13} \approx 3.60555$
8 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{16} \approx 4.00000$
9 <sup>ος</sup>	12	$\sqrt{19} \approx 4.35890$
10 <sup>ος</sup>	12	$\sqrt{21} \approx 4.58258$
11 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{25} \approx 5.00000$
12 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{27} \approx 5.19615$
13 <sup>ος</sup>	12	$\sqrt{28} \approx 5.29150$
14 <sup>ος</sup>	12	$\sqrt{31} \approx 5.56776$
15 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{36} \approx 6.00000$
16 <sup>ος</sup>	12	$\sqrt{37} \approx 6.08276$
17 <sup>ος</sup>	12	$\sqrt{39} \approx 6.24500$
18 <sup>ος</sup>	12	$\sqrt{43} \approx 6.55744$
19 <sup>ος</sup>	6	$\sqrt{48} \approx 6.92820$
20 <sup>ος</sup>	18	$\sqrt{49} \approx 7.00000$
21 <sup>ος</sup>	12	$\sqrt{52} \approx 7.21110$

Το αξιοθαύμαστο σε αυτό το πλέγμα είναι πως ο αριθμός των γειτόνων είναι ακέραια πολλαπλάσια του 6, δηλαδή παρατηρούμε ότι αριθμός των γειτόνων είναι 6, 12, 18, . . . Με βάση τα παραπάνω αποτελέσματα προκύπτουν τα παρακάτω διαγράμματα:

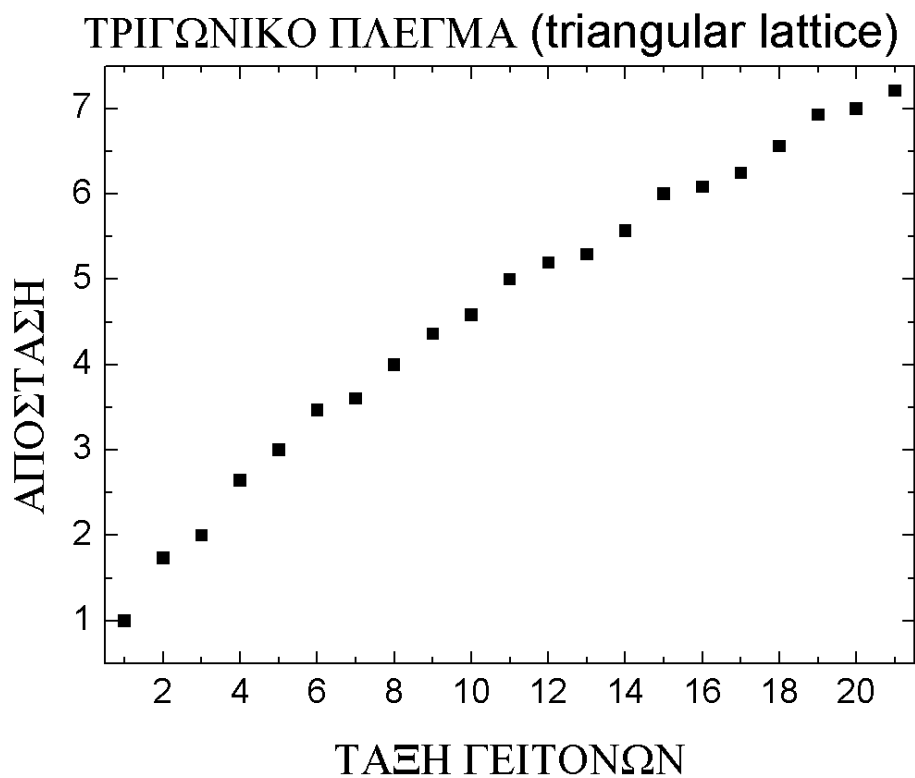
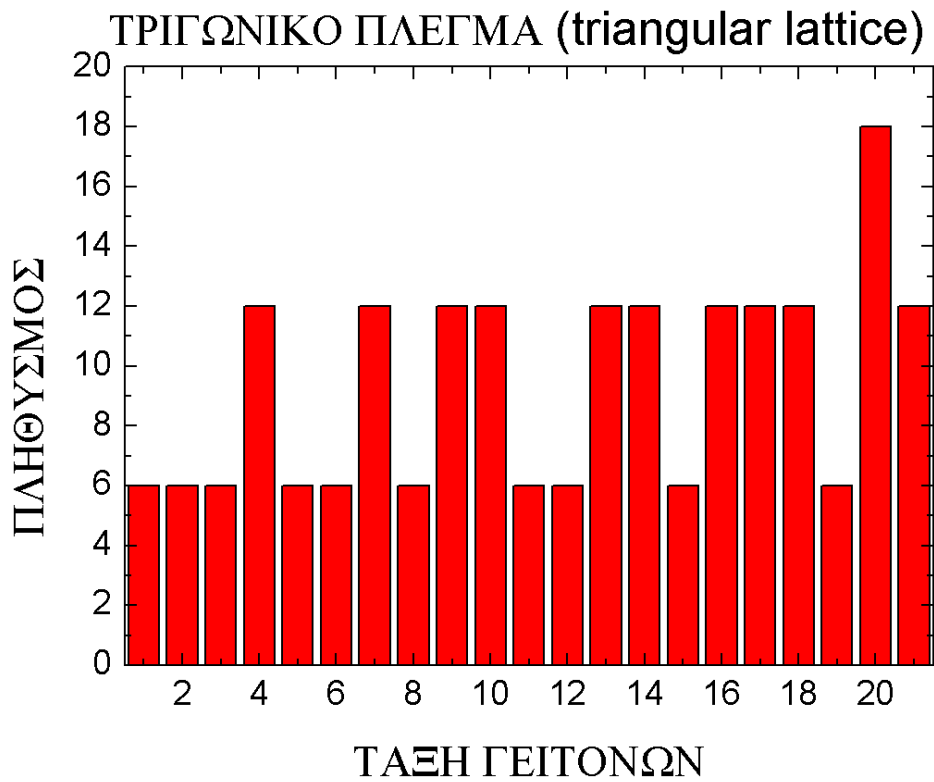




**Εικόνα 20.** Γενική του τριγωνικού πλέγματος (triangular lattice).



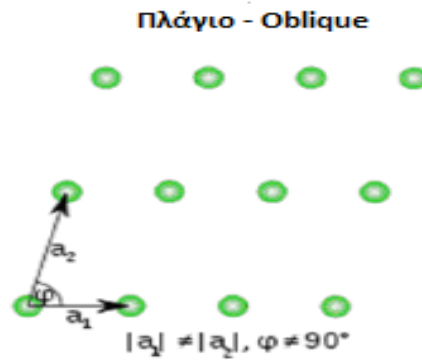
**Εικόνα 21.** Στο τριγωνικό πλέγμα, η διάταξη των έως 21<sup>ης</sup> τάξεως γειτόνων γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση  $(0,0)$  δηλαδή γύρω απ' το μαύρο τετραγωνάκι στο κέντρο του διαγράμματος.



**Εικόνα 22.** Τριγωνικό πλέγμα. Για κάθε τάξη γειτόνων παρουσιάζεται ο αριθμός τους (άνω) και η απόστασή τους από το πλεγματικό σημείο (κάτω).

### Πλάγιο πλέγμα (oblique lattice)

Το πλάγιο πλέγμα, το οποίο λαμβάνεται όταν  $|\mathbf{a}_1| \neq |\mathbf{a}_2|$  και  $\varphi \neq 90^\circ$  παρουσιάζεται στην διπλανή Εικόνα. Είναι το λιγότερο συμμετρικό διδιάστατο πλέγμα. Ο περιορισμός  $\varphi \neq 90^\circ$  χρειάζεται για να μην οδηγηθούμε στο ορθογωνικό πλέγμα. Θα θεωρήσουμε χωρίς βλάβη της γενικότητας ότι  $|\mathbf{a}_1| < |\mathbf{a}_2|$ , και  $|\mathbf{a}_1| = 1$ .



Ο λόγος  $\lambda = |\mathbf{a}_2| / |\mathbf{a}_1|$  δηλώνεται στο πρόγραμμα με τη μεταβλητή  $lprk$ . Στα παραδείγματα που εξετάζονται παρακάτω  $lprk=2$ .  $\Theta d\Theta$ , ενώ μεταβάλλουμε τη γωνία  $\varphi$ . Τα χαρακτηριστικά των  $\Theta AM$  δηλώνονται ως εξής:

**Εικόνα 23.** Το πλάγιο πλέγμα (oblique lattice).

```
open(unit=1,file="primitive_vectors_oblique")
  write(1,*) 'oblique lattice'
  write(1,*) 'primitive vectors a(i,j) i:component j:vector'
  a(1,1)=1.0d0
  a(2,1)=0.0d0
  a(1,2)=lprk*dcos(phi)
  a(2,2)=lprk*dsin(phi)
  do j=1,2
  do i=1,2
  write(1,1) i,j,i,j,a(i,j)
  enddo
  enddo
  format('i=',i1,2x,'j=',i1,2x,'a(',i1,',',i1,')=',f20.16)
close(unit=1)
```

ΠΡΩΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

Η γωνία  $\varphi = 30^\circ$ , πράγμα που δηλώνεται με τις εντολές:

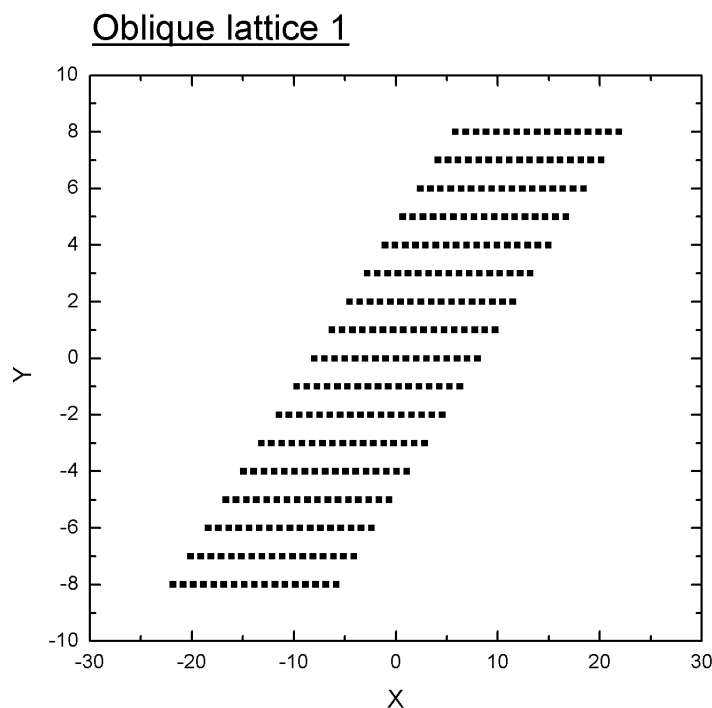
```
pi = 4.0d0*datan(1.0d0)
phi=pi/6.00d0
```

Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζουμε τα αποτελέσματά μας για τον αριθμό των γειτόνων κάθε τάξεως ενός πλεγματοκού σημείου καθώς και την απόστασή τους από το πλεγματοκού σημείο.

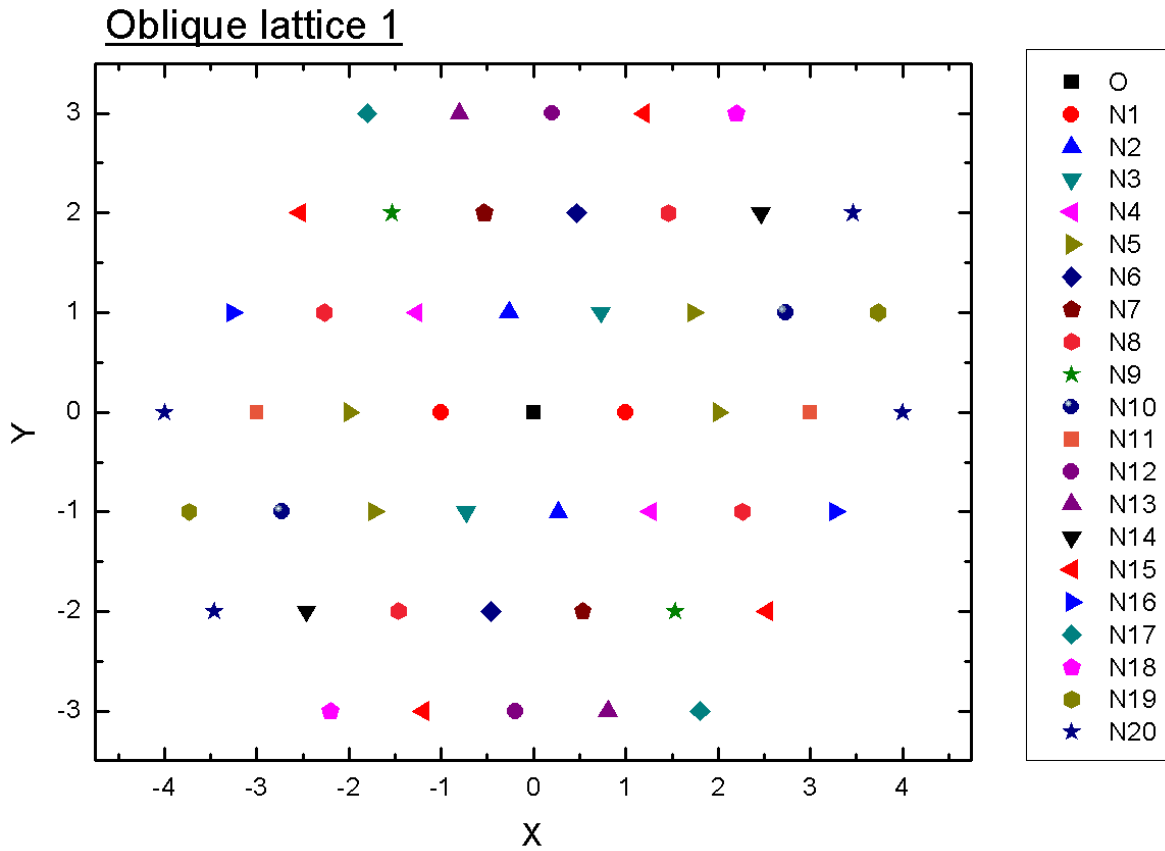
ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΤΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ
------------------	---------------------	--------------------------------------

1 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{1} \approx 1.00000$
2 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{8-8 \cos \varphi} \approx 1.03528$
3 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{5-4 \cos \varphi} \approx 1.23931$
4 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{13-12 \cos \varphi} \approx 1.61484$
5 <sup>ος</sup>	4	2.00000
6 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{25-24 \cos \varphi} \approx 2.05314$
7 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{32-32 \cos \varphi} \approx 2.07055$
8 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{20-16 \cos \varphi} \approx 2.47863$
9 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{41-40 \cos \varphi} \approx 2.52170$
10 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{5+4 \cos \varphi} \approx 2.90931$
11 <sup>ος</sup>	2	3.00000
12 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{61-60 \cos \varphi} \approx 3.00641$
13 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{72-72 \cos \varphi} \approx 3.10583$
14 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{17-8 \cos \varphi} \approx 3.17361$
15 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{52-48 \cos \varphi} \approx 3.22967$
16 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{29-20 \cos \varphi} \approx 3.41753$
17 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{85-84 \cos \varphi} \approx 3.50055$
18 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{45-36 \cos \varphi} \approx 3.71794$
19 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{8+8 \cos \varphi} \approx 3.86370$
20 <sup>ος</sup>	4	4.00000

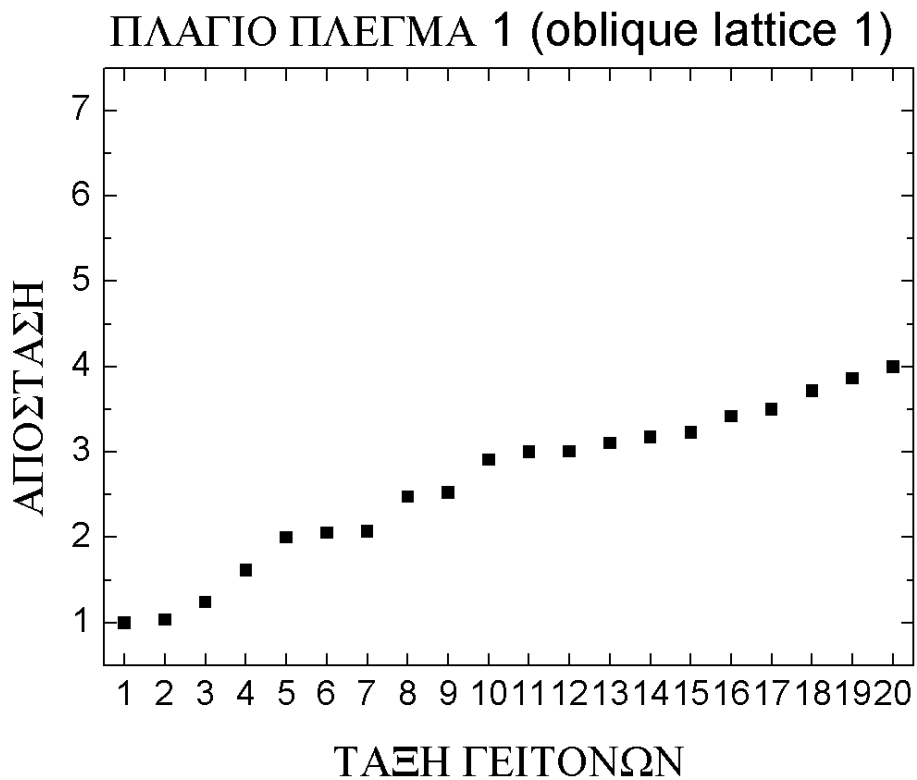
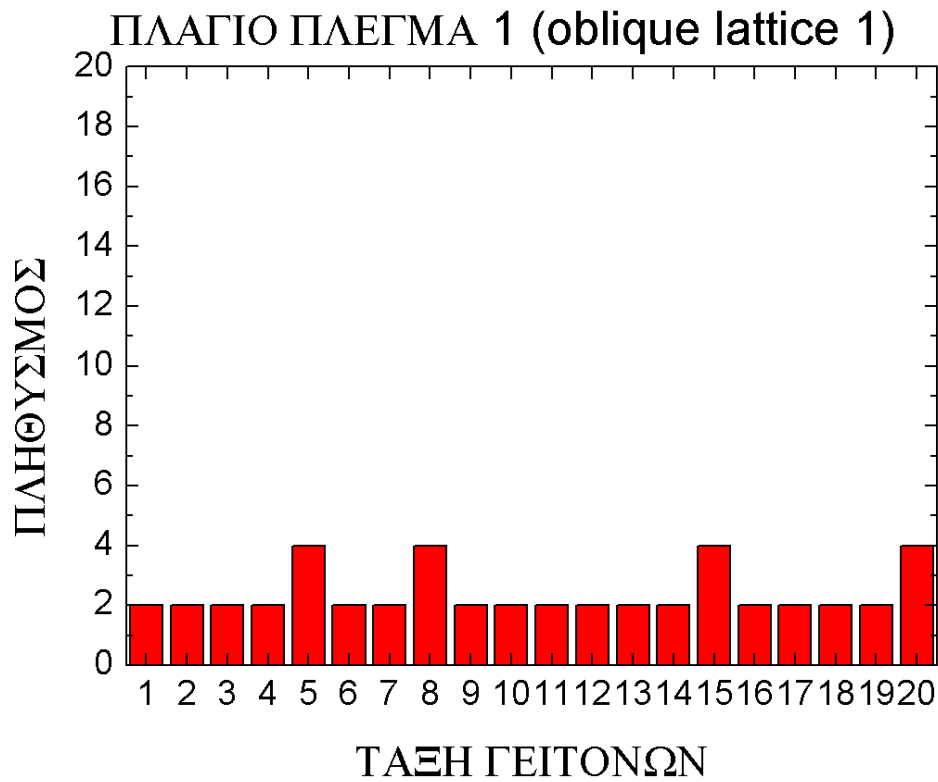
Με βάση τα παραπάνω αποτελέσματα προκύπτουν τα εξής διαγράμματα:



Εικόνα 24. Γενική άποψη του πλαγίου πλέγματος 1 (oblique lattice 1).



Εικόνα 25. Στο πλάγιο πλέγμα 1, η διάταξη των έως 20<sup>ης</sup> τάξεως γειτόνων γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση (0,0) δηλαδή γύρω απ' το μαύρο τετραγωνάκι στο κέντρο του διαγράμματος.



**Εικόνα 26** Πλάγιο πλέγμα 1. Για κάθε τάξη γειτόνων παρουσιάζεται ο αριθμός τους (άνω) και η απόστασή τους από το πλεγματικό σημείο (κάτω).

ΔΕΥΤΕΡΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

Στη δεύτερη περίπτωση πλάγιου πλέγματος που εξετάζουμε, η μεταξύ των  $\mathbf{a}_1$  και  $\mathbf{a}_2$  γωνία είναι  $10^\circ$ , πράγμα που δηλώνεται με τις εντολές:

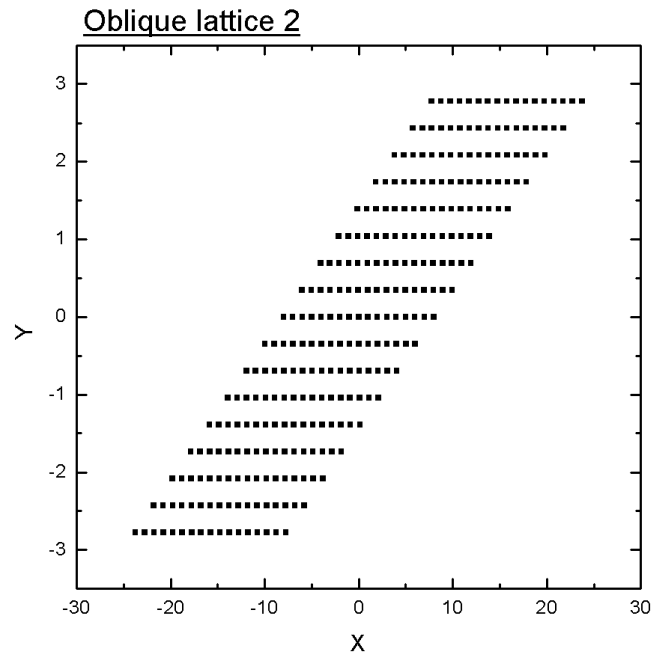
$$\rho_i = 4.0d\theta * \text{datan}(1.0d\theta)$$

$$\phi_i = \rho_i / 18.00d\theta$$

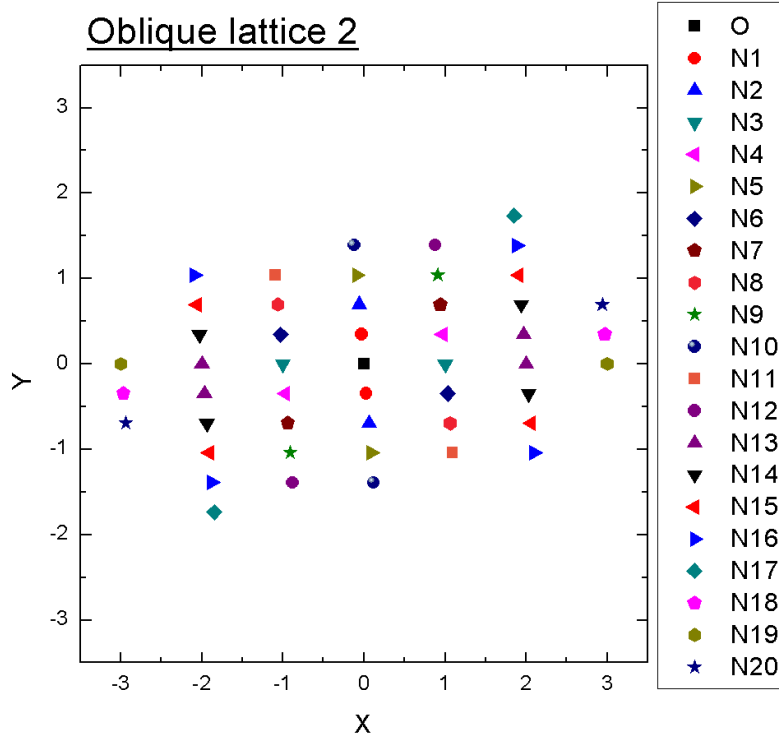
Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζουμε τα αποτελέσματά μας για τον αριθμό των γειτόνων κάθε τάξεως ενός πλεγματού σημείου καθώς και την απόστασή τους από το πλεγματού σημείο.

ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΤΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ
1 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{8 - 8 \cos \varphi} \approx 0.34862$
2 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{32 - 32 \cos \varphi} \approx 0.69725$
3 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{1} \approx 1.00000$
4 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{5 - 4 \cos \varphi} \approx 1.02994$
5 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{72 - 72 \cos \varphi} \approx 1.04587$
6 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{13 - 12 \cos \varphi} \approx 1.08734$
7 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{25 - 24 \cos \varphi} \approx 1.16817$
8 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{41 - 40 \cos \varphi} \approx 1.26795$
9 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{61 - 60 \cos \varphi} \approx 1.38258$
10 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{128 - 128 \cos \varphi} \approx 1.39449$
11 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{85 - 84 \cos \varphi} \approx 1.50869$
12 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{113 - 112 \cos \varphi} \approx 1.64363$
13 <sup>ος</sup>	4	2.00000
14 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{20 - 16 \cos \varphi} \approx 2.05987$
15 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{52 - 48 \cos \varphi} \approx 2.17468$
16 <sup>ος</sup>	4	$\sqrt{100 - 96 \cos \varphi} \approx 2.33633$
17 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{164 - 160 \cos \varphi} \approx 2.53589$
18 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{5 + 4 \cos \varphi} \approx 2.98985$
19 <sup>ος</sup>	2	3.00000
20 <sup>ος</sup>	2	$\sqrt{17 - 8 \cos \varphi} \approx 3.02019$

Σύμφωνα με τον παραπάνω πίνακα προκύπτουν τα παρακάτω διαγράμματα:

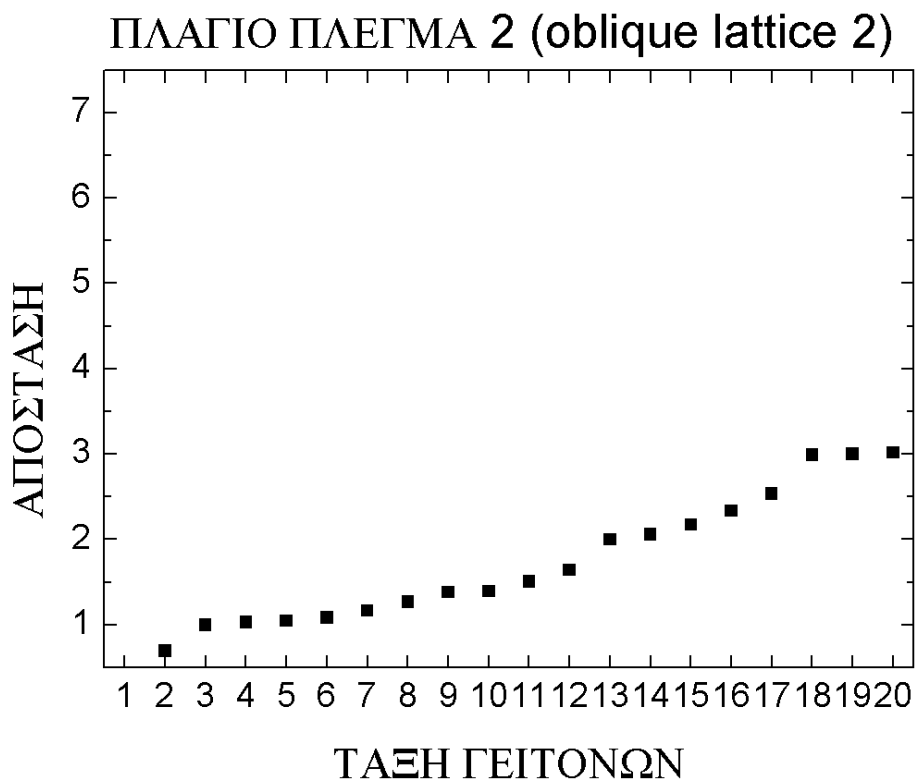
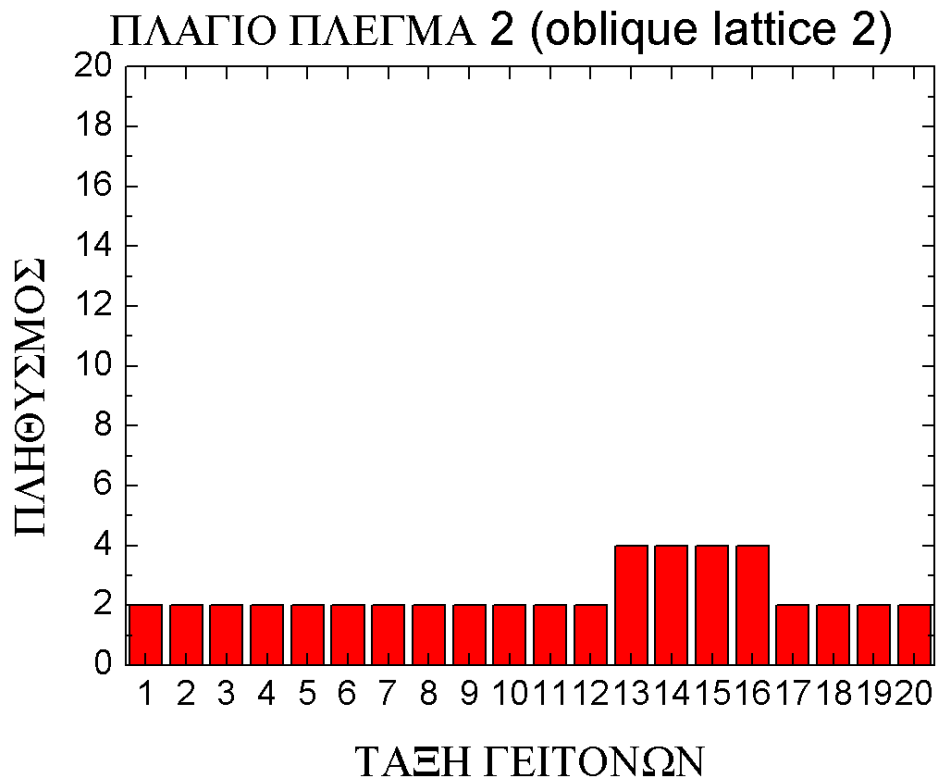


Εικόνα 27. Γενική άποψη του πλαγίου πλέγματος 2 (oblique lattice 2).



Εικόνα 28. Στο πλάγιο πλέγμα 2, η διάταξη των έως 20<sup>ης</sup> τάξεως γειτόνων γύρω από ένα πλεγματοικό σημείο που τοποθετείται στη θέση  $(0,0)$  δηλαδή γύρω από το μαύρο τετραγωνάκι στο κέντρο του διαγράμματος.





**Εικόνα 29.** Πλάγιο πλέγμα 2. Για κάθε τάξη γειτόνων παρουσιάζεται ο αριθμός τους (άνω) και η απόστασή τους από το πλεγματικό σημείο (κάτω).

## Ρομβικό πλέγμα (rhombic lattice)

Τέλος, έχουμε το ρομβικό πλέγμα, όταν τα μέτρα των θεμελιωδών διανυσμάτων είναι ίσα,  $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$  και η μεταξύ τους γωνία  $\varphi \neq 90^\circ$ ,  $\varphi \neq 60^\circ$  ή  $\varphi \neq 120^\circ$ , ώστε να μην συμπίσουμε με το τετραγωνικό ή το τριγωνικό πλέγμα. Παρακάτω θα θεωρήσουμε  $a = 1$ . Όπως φάνηκε από την ανάλυση του Κεφαλαίου 1 για το κλάσμα πυκνής διατάξεως, χρειάζεται να πάρουμε 3 περιπτώσεις:

(α') αν  $\varphi \in (0^\circ, 60^\circ)$  τότε  $D = 2a \sin(\varphi/2)$

(β') αν  $\varphi \in (60^\circ, 120^\circ)$  τότε  $D = a$ , ενώ

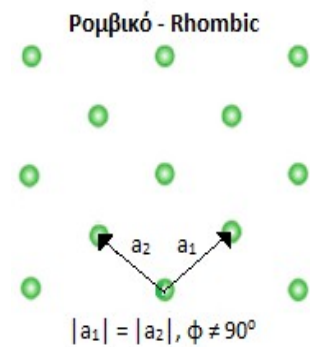
(γ') αν  $\varphi \in (120^\circ, 180^\circ)$  τότε  $D = 2a \cos(\varphi/2)$

Στο πρόγραμμα, η επιλογή της περιπτώσεως γίνεται ως εξής:

```
if ((phi.gt.0).and.(phi.lt.pi/3)) then
    D=2.0d0*sin(phi/2.0d0)
elseif ((phi.ge.pi/3).and.(phi.lt.2*pi/3)) then
    D=1.0d0
elseif ((phi.ge.2*pi/3).and.(phi.le.pi)) then
    D=2.0d0*cos(phi/2.0d0)
else
    write (*,*) 'OPA!'
endif
```

ενώ τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως ορίζονται ως εξής:

```
open(unit=1,file="primitive_vectors_rhombic11")
write(1,*) 'rhombic11 lattice'
write(1,*) 'primitive vectors a(i,j) i:component j:vector'
a(1,1)=sin(phi/2)
a(2,1)=cos(phi/2)
a(1,2)=-sin(phi/2)
a(2,2)=cos(phi/2)
do j=1,2
do i=1,2
write(1,1) i,j,i,j,a(i,j)
```



**Εικόνα 30.** Το ρομβικό πλέγμα (rhombic lattice).

```

enddo
enddo
format('i=',i1,2x,'j=',i1,2x,'a(',i1,',',i1,')=' ,f20.16)
close(unit=1)

```

(α') ΠΡΩΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

Αν  $\varphi = 30^\circ$ , δηλαδή στο εύρος γωνιών από  $0^\circ$  έως  $60^\circ$ , τότε στο πρόγραμμα γράφουμε:

```

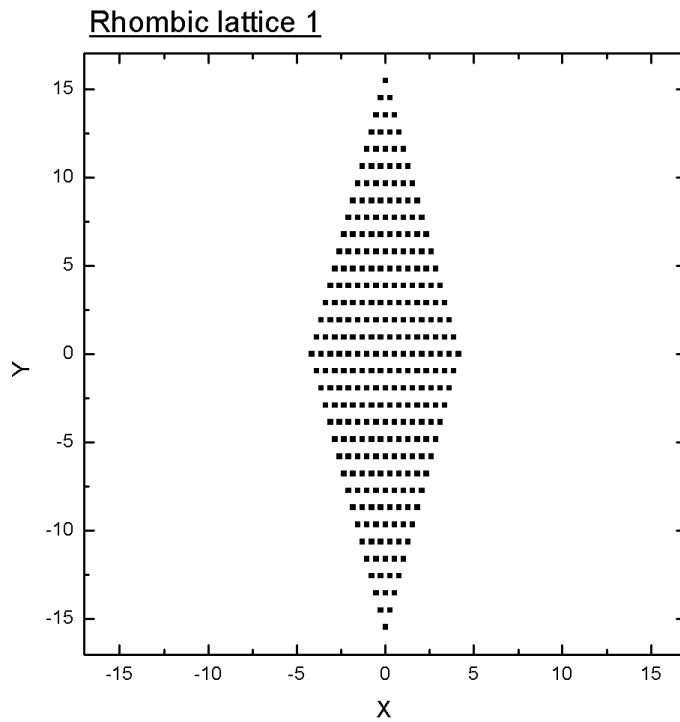
pi = 4.0d0*datan(1.0d0)
phi=pi/6.00d0 !

```

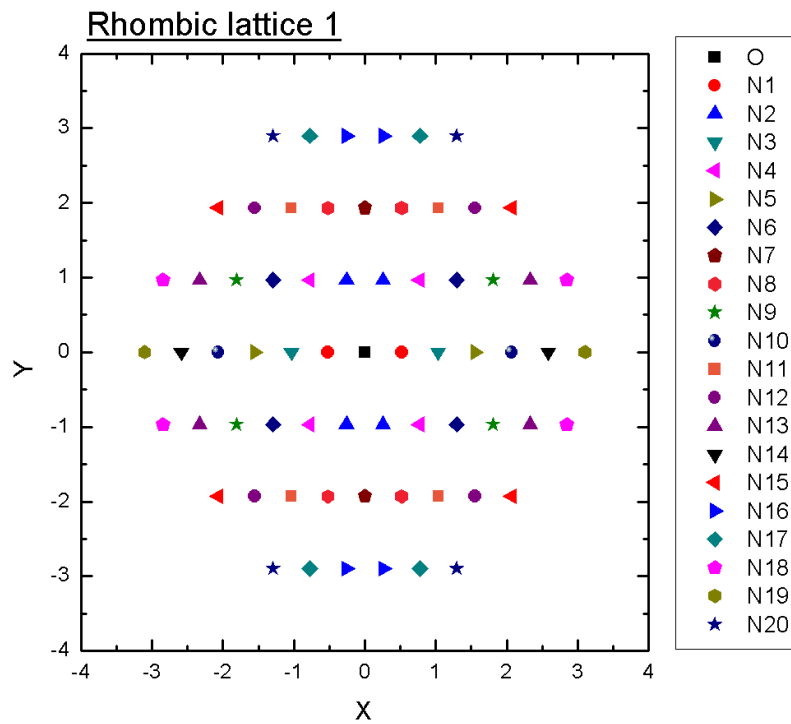
Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζουμε τα αποτελέσματά μας για τον αριθμό των γειτόνων κάθε τάξεως ενός πλεγματοειδούς σημείου καθώς και την απόστασή τους από το πλεγματοειδές σημείο.

ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΤΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ
1 <sup>ος</sup>	2	0.51764
2 <sup>ος</sup>	4	1.00000
3 <sup>ος</sup>	2	1.03528
4 <sup>ος</sup>	4	1.23931
5 <sup>ος</sup>	2	1.55291
6 <sup>ος</sup>	4	1.61484
7 <sup>ος</sup>	2	1.93185
8 <sup>ος</sup>	4	2.00000
9 <sup>ος</sup>	4	2.05314
10 <sup>ος</sup>	2	2.07055
11 <sup>ος</sup>	4	2.19177
12 <sup>ος</sup>	4	2.47863
13 <sup>ος</sup>	4	2.52170
14 <sup>ος</sup>	2	2.58819
15 <sup>ος</sup>	4	2.83183
16 <sup>ος</sup>	4	2.90931
17 <sup>ος</sup>	4	3.00000
18 <sup>ος</sup>	4	3.00641
19 <sup>ος</sup>	2	3.10583
20 <sup>ος</sup>	4	3.17361

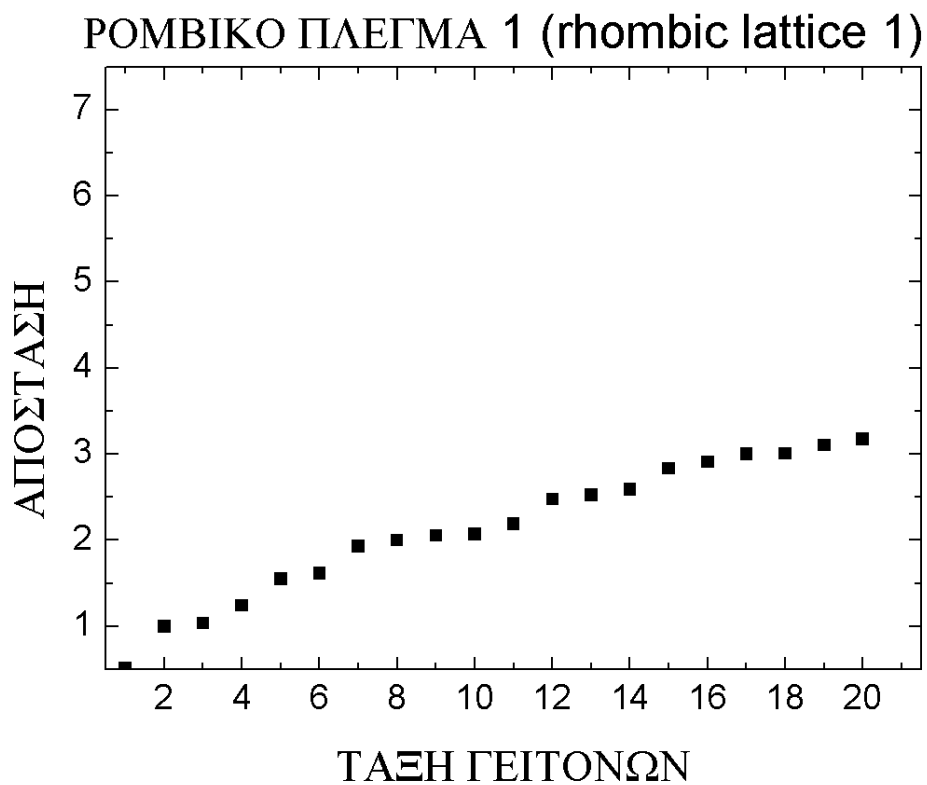
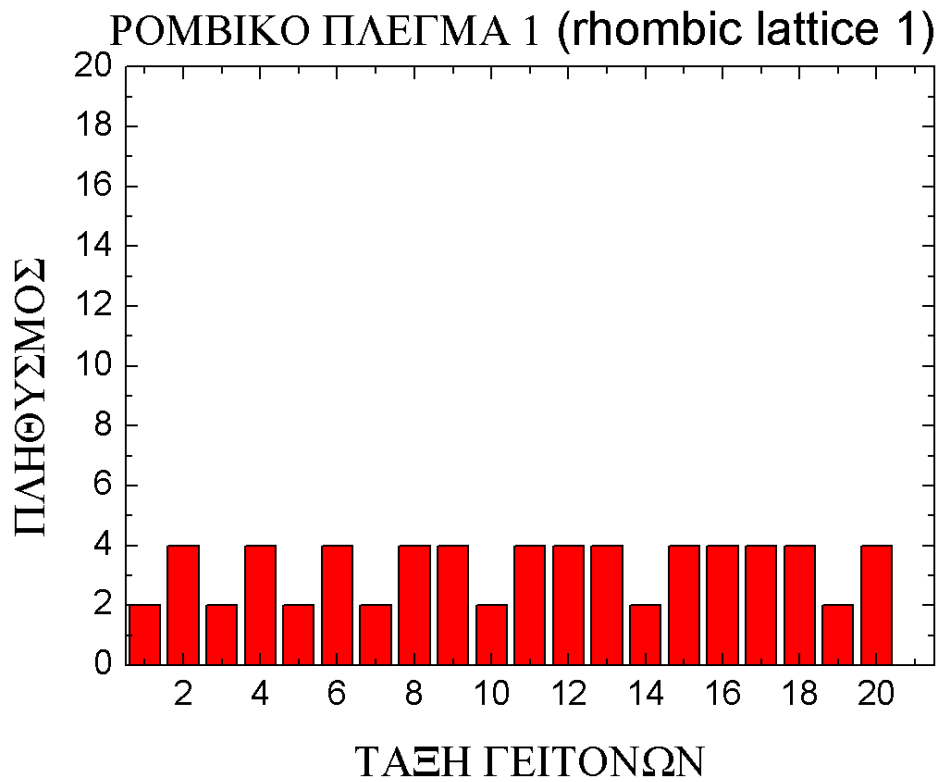
Σύμφωνα με τον παραπάνω πίνακα προκύπτουν τα εξής διαγράμματα:



**Εικόνα 31.** Γενική άποψη του ρομβικού πλέγματος 1 (rhombic lattice 1).



**Εικόνα 32.** Για το ρομβικό πλέγμα 1, η διάταξη των έως 20<sup>ης</sup> τάξεως γειτόνων γύρω από ένα πλεγματοικό σημείο που τοποθετείται στη θέση  $(0,0)$  δηλαδή γύρω από το μαύρο τετραγωνάκι στο κέντρο του διαγράμματος.



**Εικόνα 33.** Ρομβικό πλέγμα 1. Για κάθε τάξη γειτόνων παρουσιάζεται ο αριθμός τους (άνω) και η απόστασή τους από το πλεγματικό σημείο (κάτω).

ΔΕΥΤΕΡΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

Αν  $\varphi = 80^\circ$ , δηλαδή στο εύρος γωνιών από  $60^\circ$  έως  $120^\circ$ , τότε στο πρόγραμμα γράφουμε:

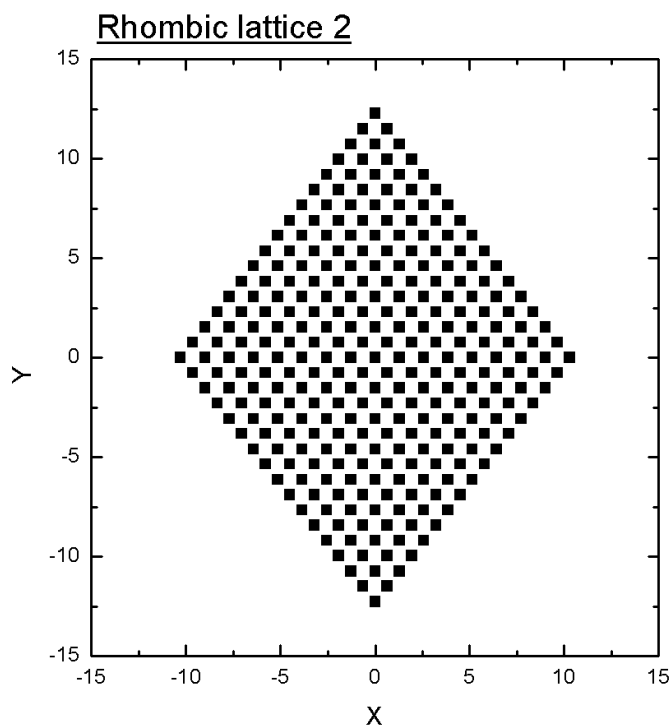
$$r_i = 4.0d\theta * \text{datan}(1.0d\theta)$$

$$\phi_i = r_i / 2.25d\theta \quad !$$

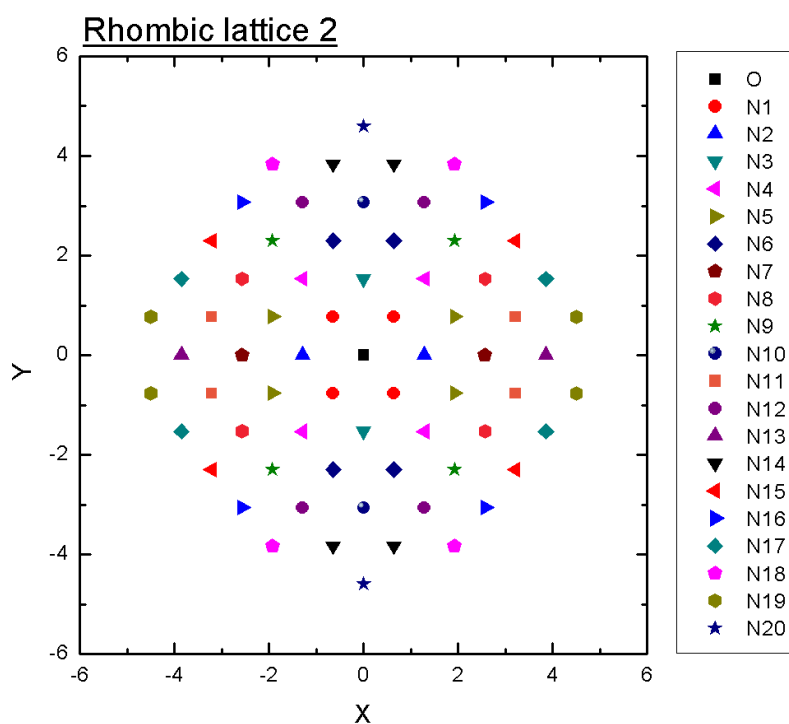
Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζουμε τα αποτελέσματά μας για τον αριθμό των γειτόνων κάθε τάξεως ενός πλεγματοειδούς σημείου καθώς και την απόστασή τους από το πλεγματοειδές σημείο.

ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΤΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ
1 <sup>ος</sup>	4	1.00000
2 <sup>ος</sup>	2	1.28558
3 <sup>ος</sup>	2	1.53209
4 <sup>ος</sup>	4	2.00000
5 <sup>ος</sup>	4	2.07495
6 <sup>ος</sup>	4	2.38633
7 <sup>ος</sup>	2	2.57115
8 <sup>ος</sup>	4	2.99301
9 <sup>ος</sup>	4	3.00000
10 <sup>ος</sup>	2	3.06418
11 <sup>ος</sup>	4	3.30397
12 <sup>ος</sup>	4	3.32293
13 <sup>ος</sup>	2	3.85672
14 <sup>ος</sup>	4	3.88378
15 <sup>ος</sup>	4	3.95105
16 <sup>ος</sup>	4	4.00000
17 <sup>ος</sup>	4	4.14990
18 <sup>ος</sup>	4	4.28826
19 <sup>ος</sup>	4	4.56426
20 <sup>ος</sup>	2	4.59627

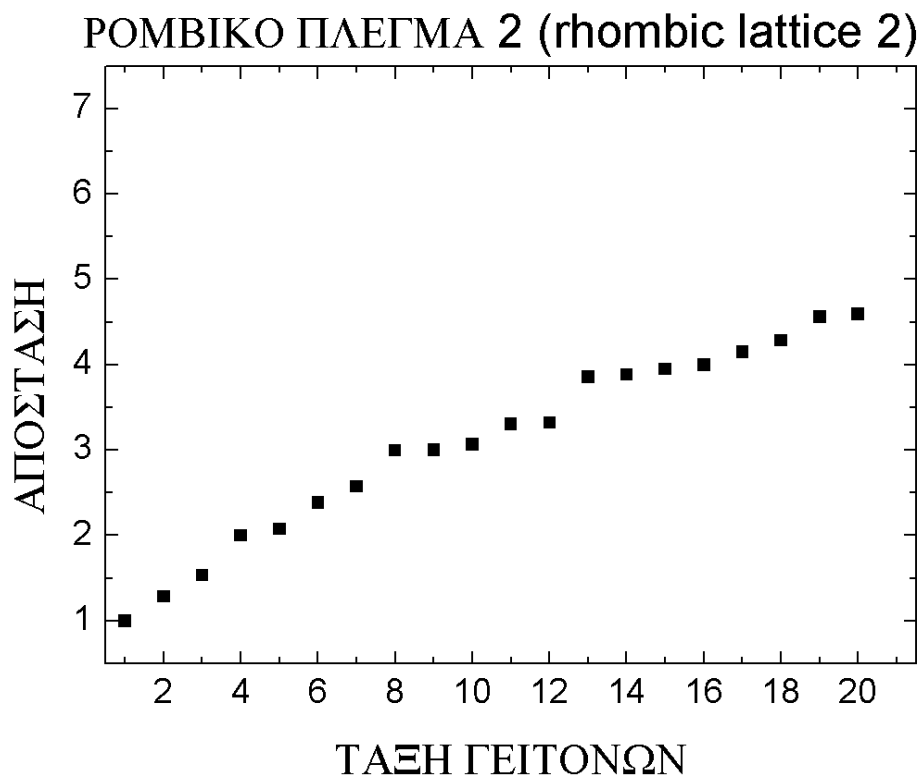
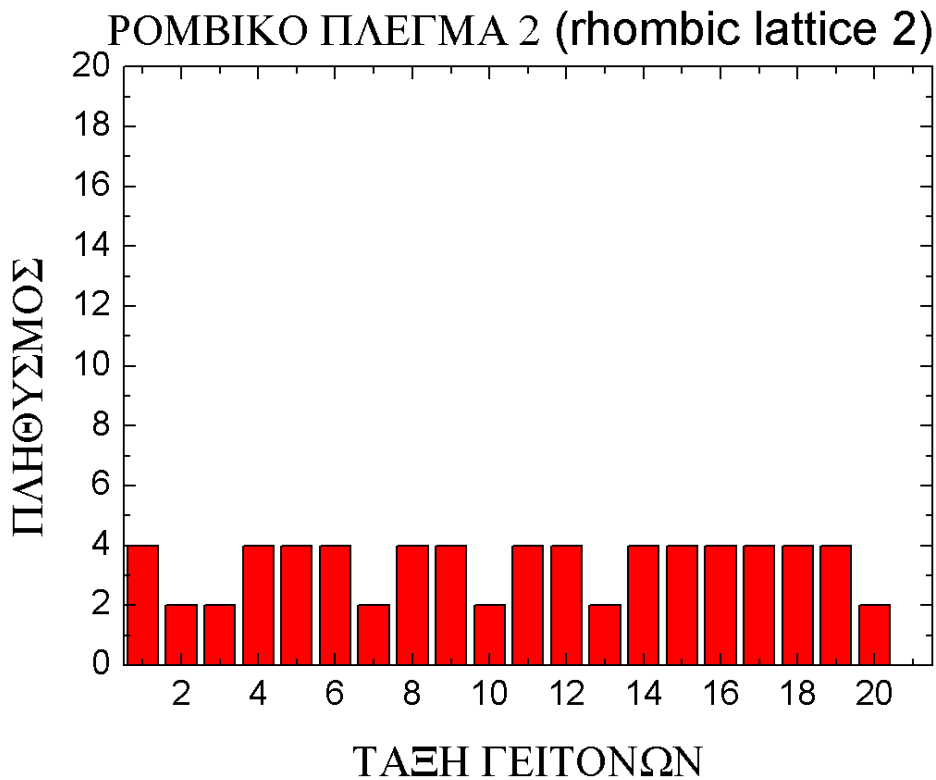
Σύμφωνα με τον πίνακα που φαίνεται παραπάνω σχεδιάζουμε τα δύο διαγράμματα για το ρομβικό πλέγμα στη δεύτερη περίπτωση.



**Εικόνα 34.** Γενική άποψη του ρομβικού πλέγματος 2 (rhombic lattice 2).



**Εικόνα 35.** Για το ρομβικό πλέγμα 2, η διάταξη των έως 20<sup>ης</sup> τάξεως γειτόνων γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση  $(0,0)$  δηλαδή γύρω από το μαύρο τετραγωνάκι στο κέντρο του διαγράμματος.



**Εικόνα 36.** Ρομβικό πλέγμα 2. Για κάθε τάξη γειτόνων παρουσιάζεται ο αριθμός τους (άνω) και η απόστασή τους από το πλεγματικό σημείο (κάτω).

ΤΡΙΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

Αν  $\varphi = 150^\circ$ , δηλαδή στο εύρος γωνιών από  $120^\circ$  έως  $180^\circ$ , τότε στο πρόγραμμα γράφουμε:



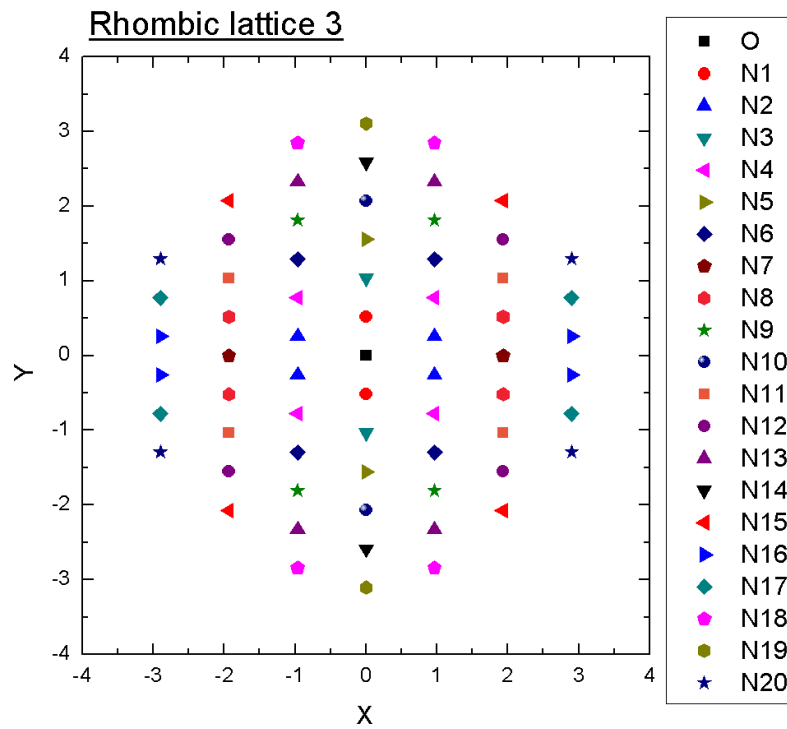
$$\rho_i = 4.0d\theta * \text{datan}(1.0d\theta)$$

$$\rho_i = \rho_i / 1.2d\theta \quad !$$

Στον επόμενο πίνακα παρουσιάζουμε τα αποτελέσματά μας για τον αριθμό των γειτόνων κάθε τάξεως ενός πλεγματοειδούς σημείου καθώς και την απόστασή τους από το πλεγματοειδές σημείο.

ΤΑΞΗ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΡΙΘΜΟΣ ΓΕΙΤΟΝΩΝ	ΑΠΟΣΤΑΣΗ ΑΠΟ ΤΟ ΠΛΕΓΜΑΤΙΚΟ ΣΗΜΕΙΟ
1 <sup>ος</sup>	2	0.51764
2 <sup>ος</sup>	4	1.00000
3 <sup>ος</sup>	2	1.03528
4 <sup>ος</sup>	4	1.23931
5 <sup>ος</sup>	2	1.55291
6 <sup>ος</sup>	4	1.61484
7 <sup>ος</sup>	2	1.93185
8 <sup>ος</sup>	4	2.00000
9 <sup>ος</sup>	4	2.05314
10 <sup>ος</sup>	2	2.07055
11 <sup>ος</sup>	4	2.19177
12 <sup>ος</sup>	4	2.47863
13 <sup>ος</sup>	4	2.52170
14 <sup>ος</sup>	2	2.58819
15 <sup>ος</sup>	4	2.83183
16 <sup>ος</sup>	4	2.90931
17 <sup>ος</sup>	4	3.00000
18 <sup>ος</sup>	4	3.00641
19 <sup>ος</sup>	2	3.10583
20 <sup>ος</sup>	4	3.17361

Παρατηρούμε ότι εάν δύο ρομβικά πλέγματα έχουν παραπληρωματικές γωνίες, τότε ο αριθμός και οι αποστάσεις των κάθε τάξεως γειτόνων είναι ίσες. Άρα για την τρίτη περίπτωση όπου  $\phi = 150^\circ$ , τα διαγράμματα είναι ταυτόσημα με αυτά της πρώτης περιπτώσεως όπου  $\phi = 30^\circ$ . Μπορεί να αποδειχθεί ότι τα δύο αυτά πλέγματα είναι στραμμένα το ένα ως προς το άλλο κατά  $90^\circ$ .



**Εικόνα 37.** Για το ρομβικό πλέγμα 3, η διάταξη των έως 20<sup>ης</sup> τάξεως γειτόνων γύρω από ένα πλεγματικό σημείο που τοποθετείται στη θέση  $(0,0)$  δηλαδή γύρω από το μαύρο τετραγωνάκι στο κέντρο του διαγράμματος. Πρόκειται για στροφή του ρομβικού πλέγματος 1 κατά  $90^\circ$ , όπως μπορεί, άλλωστε, να αποδειχθεί.

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Παναγιώτη Α. Βαρώτσου και Καίσαρος Δ. Αλεξόπουλου, Φυσική Στερεάς Κατάστασης, Νέα Έκδοση, Εκδότης Σαββάλας, Αθήνα, 1995. Κεφάλαιο πρώτο: Δομή των κρυστάλλων.
  
- [2] C. Kittel, Εισαγωγή στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης, Μετάφραση: Χ. Παπαγεωργοπούλου, Εκδόσεις Α. Γ Πνευματικού, 5η έκδοση, Αθήνα, 1979. Κεφάλαιο πρώτο: Κρυσταλλική Δομή.
  
- [3] Ibach Harald και Lüth Hans, Φυσική Στερεάς Κατάστασης, Εισαγωγή στις Αρχές της Επιστήμης των Υλικών, Επιμέλεια: Σωτήριος Βες, Μετάφραση: Σωτήριος Βες, Ελένη Παλούρα, Αντώνης Αναγνωστόπουλος, Χαρίτων Πολάτογλου, Κεφάλαιο 2: Δομή της στερεάς ύλης. Εκδόσεις ΖΗΤΗ, 2012, Θεσσαλονίκη.
  
- [4] Κ. Σιμσερίδη, Σημειώσεις προπτυχιακού μαθήματος Καταστάσεις και Ιδιότητες της Ύλης, του Τμήματος Φυσικής του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών. 2014.