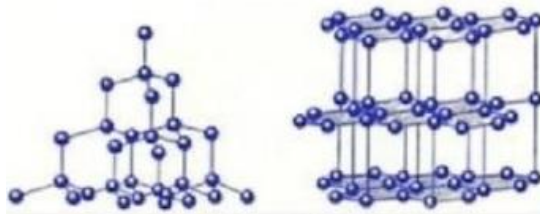
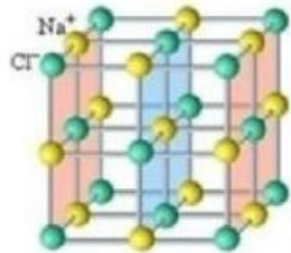


Семинар №1

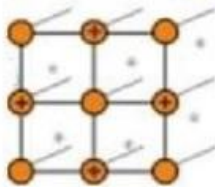
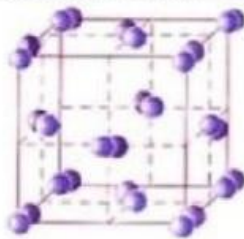
Структура и колебания кристаллических решеток

Кубышкин А.В. для 2-885 и 4-841 - февраль 2021

Типы кристаллических решеток (по природе связи)



Кристаллические решетки алмаза (слева) и графита (справа)



Тип решетки	Примеры веществ	Физические свойства веществ
<u>Ионная</u>	Соли, оксиды и гидроксиды типичных металлов	Твердые, хрупкие, тугоплавкие, многие растворимы в воде, расплавы проводят электрический ток
<u>Атомная</u>	алмаз(C), графит(C), бор(B), кремний(Si). оксид алюминия (Al ₂ O ₃), оксид кремния (IV)-SiO ₂	Очень твердые, очень тугоплавкие, прочные, нелетучие, не растворимы в воде
<u>Молекулярная</u>	При обычных усл.–г/ж (O ₂ , H ₂ , Cl ₂ , N ₂ , Br ₂ , H ₂ O, CO ₂ , HCl) Сера S ₈ , белый фосфор P ₄ , йод I ₂ ; органические вещества	Непрочные, летучие, легкоплавкие, способны к возгонке, имеют небольшую твердость
<u>Металлическая</u>	Металлы и сплавы	Ковкие, обладают блеском, пластичностью, тепло- и электропроводны

Типы решеток Бравэ (по симметрии). Индексы Миллера

Системы и примеры	Тип решетки			
	Примитивная	Базо-центрированная	Объемно-центрированная	Гране-центрированная
Триклинная $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ K_2CrO_7				
Моноклинная $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ S_β				
Ромбическая $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $S_\alpha; Fe_3C$				
Тригональная $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ As, Bi				
Тетрагональная $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ Sn, TiO_2				
Гексагональная $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ Zn, Cd				
Кубическая $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $Cu, Fe, NaCl$				

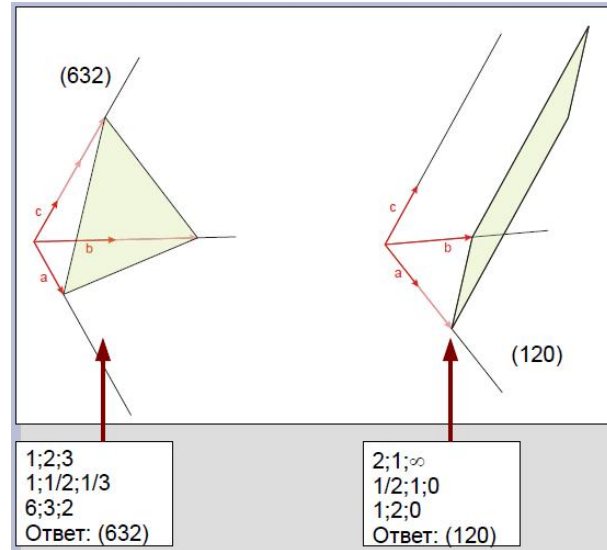
Позиция атома в ячейке: в координатах геометрического базиса векторов трансляции (не ортонормированного!)

$$\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4} \longrightarrow \vec{r} = \frac{1}{2}\vec{a} + \frac{1}{4}\vec{b} + \frac{3}{4}\vec{c}$$

Направление в кристалле: по геометрическому базису векторов трансляции, указывается в квадратных скобках.

$$[1, 2, 3] \longrightarrow \vec{d} = 1 \cdot \vec{a} + 2 \cdot \vec{b} + 3 \cdot \vec{c}$$

не ортонормированный базис, для некубических решёток нужно быть осторожным.



построить плоскость до пересечения с кристаллографическими осями координат
определить какие отрезки (в единицах соответствующих постоянных решётки) отсекает эта плоскость от осей координат
взять обратные к этим числам
привести их к наименьшему целому, кратному этим числам.

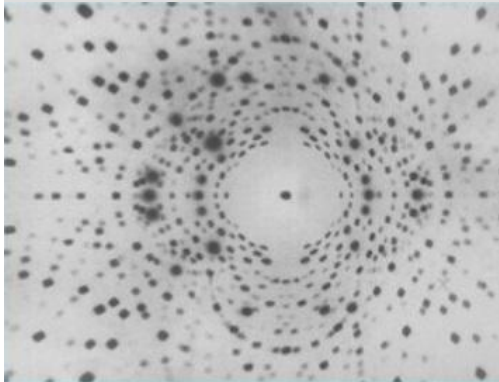
Дифракция на кристалле. Условие Брэгга-Вульфа

Рентгеновское излучение, 10 кэВ

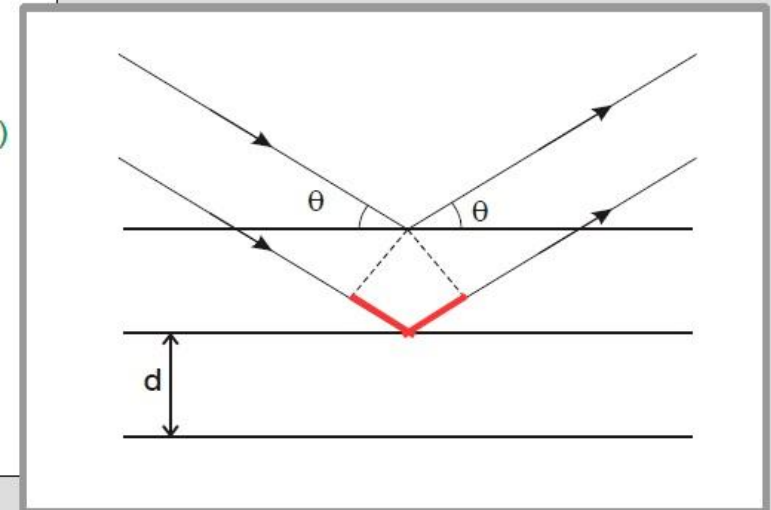
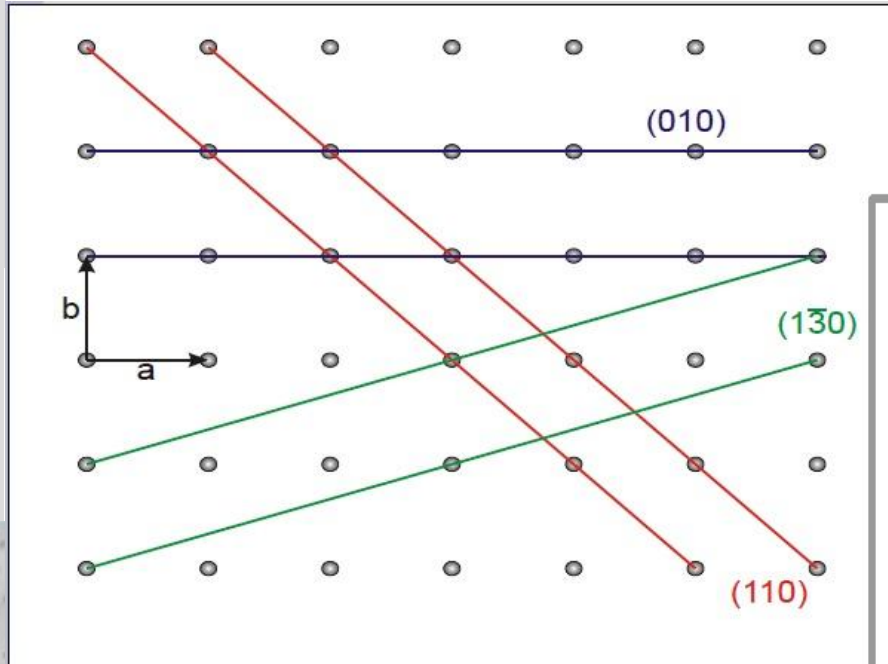
$$\lambda = \frac{hc}{E} = 0.12 \text{ нм}$$

Тепловые нейтроны, 25 мэВ

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = 0.18 \text{ нм}$$



Рентгенограмма ориентированного монокристалла берилла



$$2d \sin \theta = n \lambda$$

Задача Т1

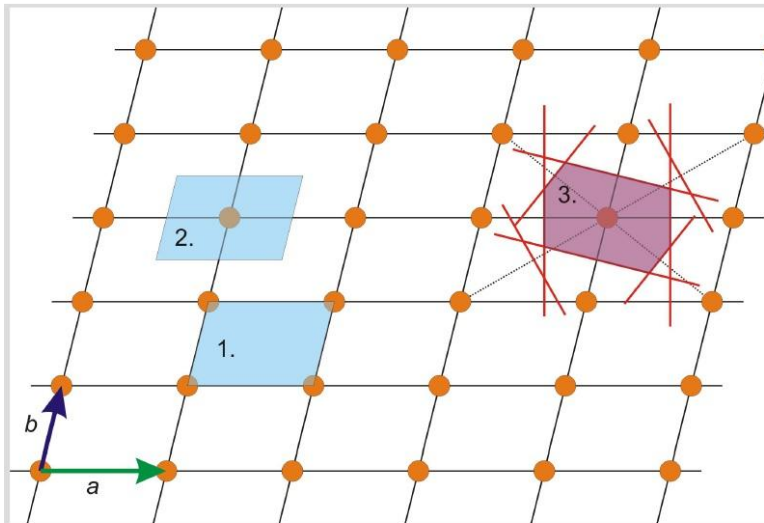
Обратная решетка. Условие дифракции. 1-я зона Бриллюэна и ячейка Вигнера-Зейца

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{[\vec{b} \times \vec{c}]}{(\vec{a} [\vec{b} \times \vec{c}])}$$

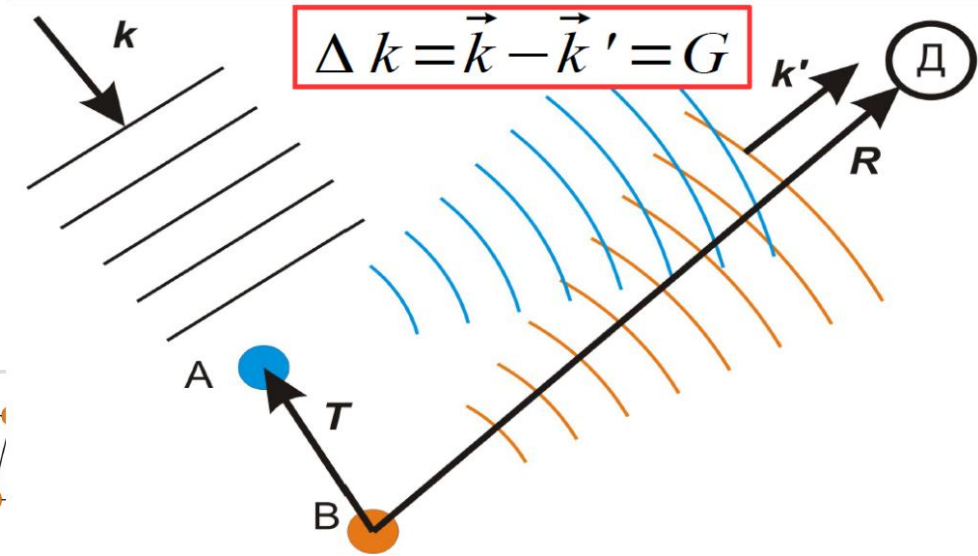
$$\vec{b}^* = 2\pi \frac{[\vec{c} \times \vec{a}]}{(\vec{a} [\vec{b} \times \vec{c}])}$$

$$\vec{c}^* = 2\pi \frac{[\vec{a} \times \vec{b}]}{(\vec{a} [\vec{b} \times \vec{c}])}$$

Если конец волнового вектора лежит на границе зоны Бриллюэна — условие дифракции выполнено.



Варианты выбора элементарной ячейки на двумерной решетке: 1 и 2 - построение на векторах трансляции с разным расположением элементарной ячейки относительно узлов решетки, 3 - построение ячейки Вигнера-Зейца.



Первая зона Бриллюэна — ячейка Вигнера-Зейца в пространстве обратной решетки.

Задача Т1 – 2 способ!

$$\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G}$$

$$\vec{k}' = \vec{k} - \vec{G}$$

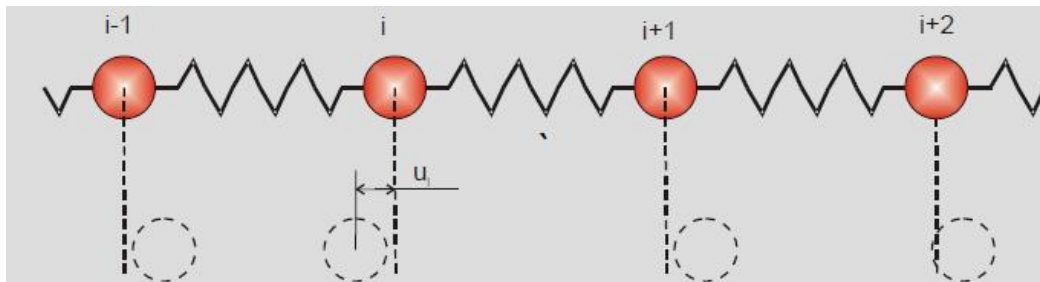
$$G^2 = 2\vec{k} \cdot \vec{G}$$

Колебания в одномерной одноатомной цепочке

Ищем решение в виде бегущей волны с произвольной амплитудой

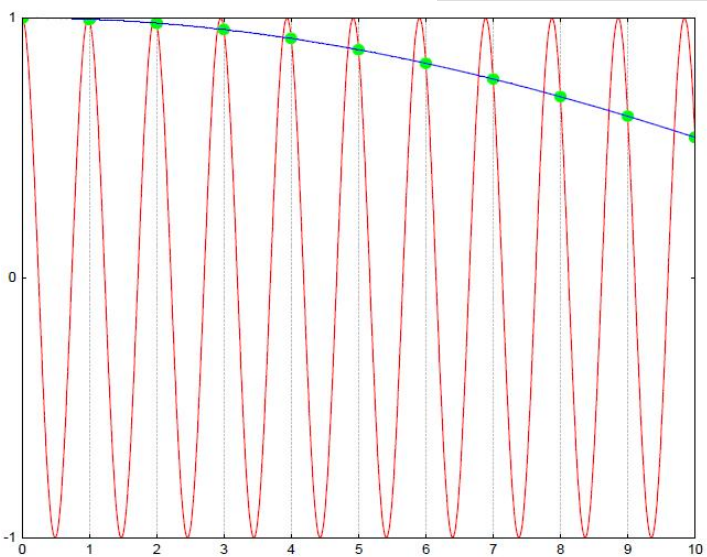
$$u_j = u_0 e^{i(kx_j - \omega t)}$$

$$x_j = j \cdot a$$



$$M \frac{d^2 u_j}{dt^2} = C (u_{j+1} + u_{j-1} - 2u_j)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{2s}{a} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$



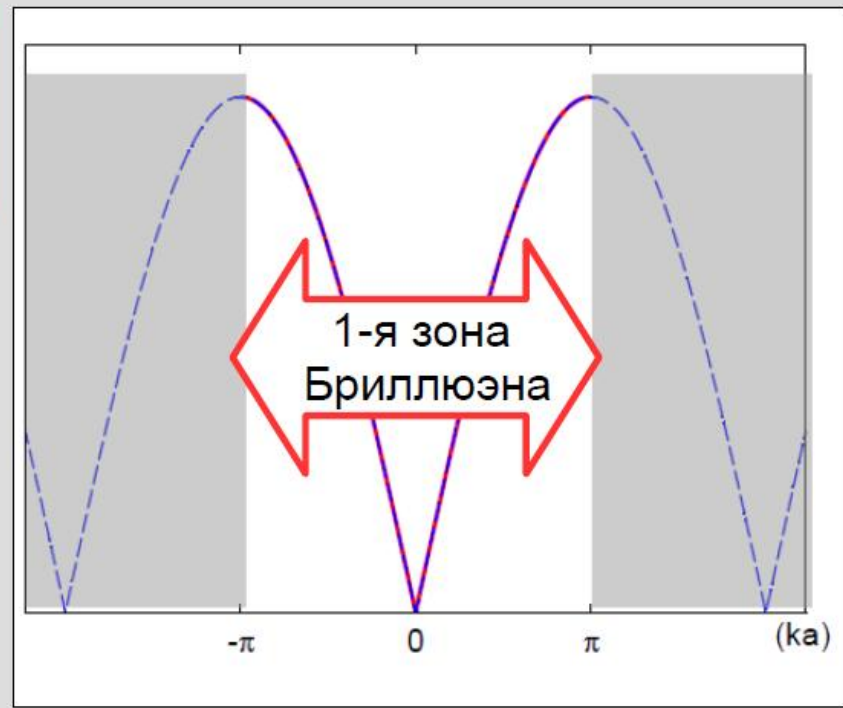
$$s = 10^3 \text{ м/сек}$$

$$a = 2 \cdot 10^{-10} \text{ м}$$

↓

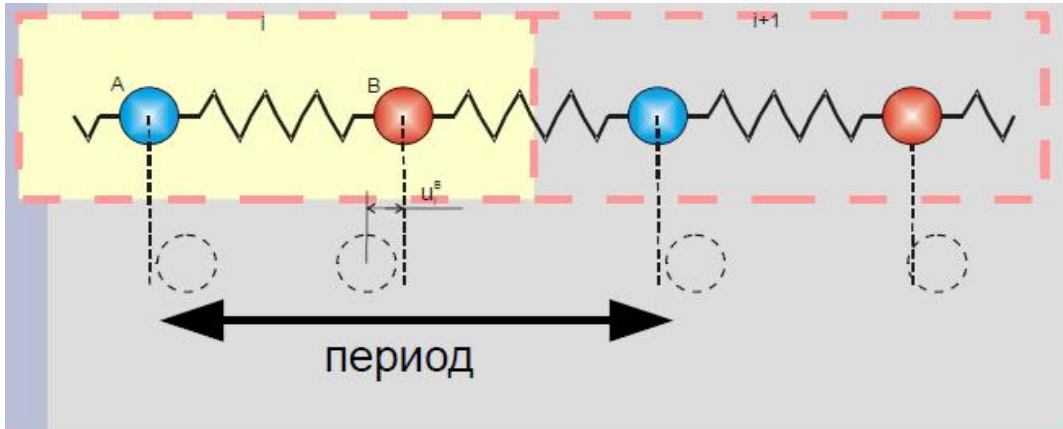
$$\omega_{max} \approx 10^{13} \text{ 1/сек}$$

(ИК спектр, соответствует энергии ~7мэВ или температуре около 80К)



Задача 2.19

Колебания в одномерной цепочке с атомами двух сортов



$$-\omega^2 M_B U_B = C (U_A + U_A e^{i k a} - 2 U_B)$$

$$-\omega^2 M_A U_A = C (U_B e^{-i k a} + U_B - 2 U_A)$$

$$\det \begin{pmatrix} 1 + e^{i k a} & -2 + \frac{M_B}{C} \omega^2 \\ -2 + \frac{M_A}{C} \omega^2 & 1 + e^{-i k a} \end{pmatrix} = 0$$

$$2(1 + \cos(k a)) = \left(-2 + \frac{M_B}{C} \omega^2 \right) \left(-2 + \frac{M_A}{C} \omega^2 \right)$$

