ЛЕКЦИЯ 2

КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ ТЕЛ (ПРОДОЛЖЕНИЕ)

1. Гармонические колебания одномерной решетки одинаковых атомов

Сложная решетка — это совокупность решетки Бравэ и базиса:

ГЦК $(0,0,0); \left(\frac{a}{2},\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right)$, ОЦК $(0,0,0); \left(\frac{a}{2},\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right)$.

Решетка Бравэ — это совокупность простой решетки и базиса:

ГЦК = ПК+$\left(\frac{a}{2},\frac{a}{2},0\right); \left(\frac{a}{2},0,\frac{a}{2}\right); \left(0,\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right)$. Получаем сложную решетку.

Элементарная ячейка наименьшего объема (примитивная) — это такая элементарная ячейка, что в моноатомной решетке атомы расположены только в вершинах многогранника.

В качестве примитивной ячейки нужно выбрать такую, чтобы она содержала в себе только один атом и при этом обладала всеми операциями симметрии — отражениями, поворотами прямой решетки. Такая ячейка называется **ячейкой Вигнера-Зейца**. Рассмотрим двумерный случай.

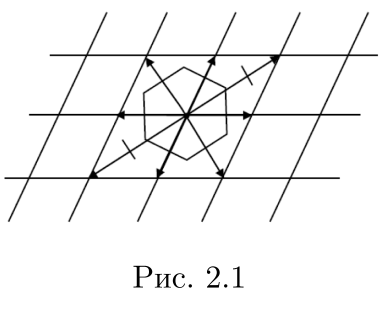

Рис. 2.1

Соединим атом со всеми другими (можно просто ближайшими) и рассмотрим фигуру, образующуюся при пересечении плоскостей, проходящих через середины этих отрезков. В данном случае получается шестиугольник. В общем случае это будет или шестиугольник, или прямоугольник. Данными фигурами можно без пересечений и просветов замостить всю плоскость. Данный многоугольник содержит только один узел.

Для ОЦК-решетки нам надо взять куб и начать «срезать» его вершины, отсекая их плоскостями. В результате каждая грань станет квадратом, но более маленьким. На месте вершин мы получим правильные шестиугольники, а всего же будет 14 граней — 6 квадратов на месте предыдущих граней и 8 шестиугольников на месте предыдущих вершин.

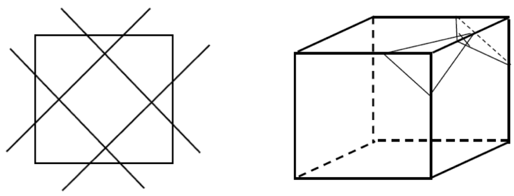

Рис. 2.2

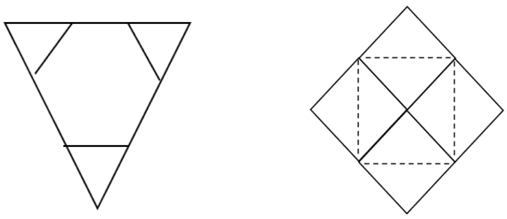

Рис. 2.3

Для ГЦК-решетки получится двенадцатигранник, гранями которого являются ромбы; он называется ромбический додекаэдр.

2. Дифракция в кристаллах

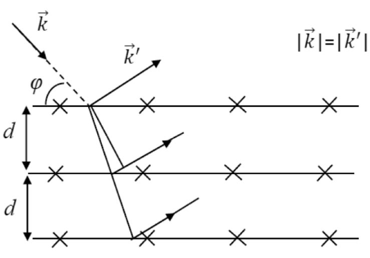

Рис. 2.4

Плоская электромагнитная волна с волновым вектором $\vec{k}$ попадает на кристаллическую структуру. При возбуждении вторичных волн, центрами которых являются атомы, может получиться отражение волны с волновым вектором $\vec{k}' : |\vec{k}'| = |\vec{k}|$. Если есть много плоскостей, то отражение будет происходить от каждой из них.

Если при этом волны будут синфазны, то получится хорошее усиление. Для синфазности разность хода волн от разных плоскостей должна быть пропорциональна длине волны излучения. Разность хода:

$$\delta = 2d\sin\phi = n\lambda - \textbf{условие Брэгга.}$$

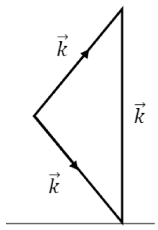

Рис. 2.5

Если рассмотреть решетку как одну частицу, то при взаимодействии с волной, она должна перейти сама в себя, чтобы квадрат модуля волновой функции не поменялся. Обозначим через $\vec{K}$ вектор, являющийся разностью падающего и отраженного луча. Тогда:

$$Kd = 2\pi n; 2k\sin\phi\, d = 2\pi n\,,$$

а поскольку $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, то получим то же выражение Брэгга.

Поскольку решетка дискретна, то она не может принимать сколь угодно малый импульс, а только квантованный. Условие Брэгга и есть условие квантования импульса. Само понятие «импульс» можно ввести только в пустом пространстве, поэтому в решетке мы имеем не закон сохранения импульса, а квазиимпульса.

Для того, чтобы узнать направление в кристалле, нужно взять атом, от которого производится отсчет, найти расстояния по осям до нужного атома, затем найти целые числа с таким же направлением:

$$\left(\frac{5}{2}, 3, \frac{1}{3}\right) \to (15, 18, 2).$$

Обычно направления ставятся в прямые скобки: $[15, 18, 2]$

3. Направление плоскости

Поскольку плоскость задается тремя точками, в которых находятся атомы, то выразим эти точки в единицах a: $x = \alpha a; y = \beta a; z = \gamma a$.

Затем возьмем следующие числа:

$$\left(\frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\beta}, \frac{1}{\gamma}\right)$$

и домножим их так, чтобы получились целые: (h, k, l) — такой вектор и называют направлением плоскости. Для примера рассмотрим плоскости $(1, 0, 0); (0, 1, 0); (1, 1, 0); (1, 1, 1)$.

1. В кубических кристаллах (ПК, ОЦК, ГЦК) направление $[h, k, l]$ перпендикулярно плоскости (h, k, l).

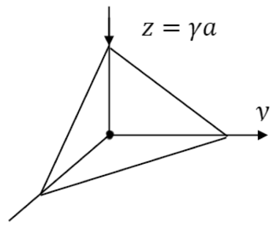

Рис. 2.6

2. Плоскость, заданная направлением (h, k, l), на самом деле является не единственной; это целое семейство параллельных плоскостей. Расстояние между ближайшими плоскостями $d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$.

Если взять ПК-решетку и выбрать такое направление, при котором будет происходить дифракция, а затем поменять решетку на ОЦК, то тогда дифракция полностью погасится. Произойдет это из-за того, что плоскость находящаяся посередине между первоначальными даст сдвиг фазы на π, и отражения получатся в противофазе. Это называется структурным фактором.

Если же вместо плоскости посередине будет плоскость из других атомов, то рассеяние будет происходить уже по-другому, и отражения полностью не погасятся. Это называется атомным фактором.

Рис. 2.7

4. Поведение кристаллов при нулевых и ненулевых температурах

Известно, что даже при абсолютном нуле все равно существуют колебания — нулевые колебания.

Гелий является единственным элементом, который не кристаллизуется при нулевой температуре, как раз из-за нулевых колебаний. Если эти колебания больше, чем яма, в которой находится атом, то он из нее выберется. Если же увеличить давление, например, до 25 атмосфер, то гелий можно закристаллизовать.

Рассмотрим задачу о колебаниях взаимодействующих атомов.

Имеется бесконечная спица, на которую нанизаны шарики, соединенные пружиной. Масса шариков одинакова и равна m, жесткость пружины, соединяющей их, β. Локализовать колебание одного шарика невозможно. $x_n = na$ — положение n-ого атома, а U_n — его смещение. Запишем уравнение для смещения n-ого атома:

$$m\ddot{U}_n = -\beta(U_n - U_{n+1}) - \beta(U_n - U_{n-1}) \,.$$

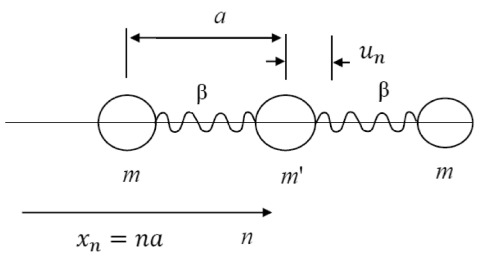

Рис. 2.8

Для других атомов уравнения тоже будут включать положения соседей. Решение находится в виде волны:

$$U_n(x,t) = A\exp\{i(kx_n - \omega t)\}\,.$$

Смещение шариков у всех свое, но на самом деле они связаны огибающей, и каждое смещение задается смещением фазы.

$$-m\omega^2 U_n - \beta U_n(1-e^{ika}) - \beta U_n(1+e^{-ika})\,,$$

$$U_n\{-m\omega^2 + \beta(2 - e^{ika} + e^{-ika})\} = 0\,.$$

Поскольку нас интересует $U_n \neq 0$, то надо потребовать, чтобы то, что стоит в скобках, было равно нулю. Получим

$$\omega^2 = 4\omega_0^2 \sin^2\frac{ka}{2},$$

где $w_0 = \sqrt{\frac{\beta}{m}}$, поскольку частота — положительная величина, то получаем:

$$\boxed{\omega = 2\omega_0\left|\sin\frac{ka}{2}\right|}$$

Таким образом мы получили, что среда является дисперсионной, т. к. частота зависит от волнового вектора нелинейно.

Нарисуем наше соотношение на графике:

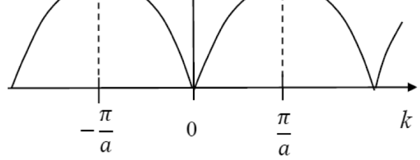

Рис. 2.9

Можно заметить, что в нашей структуре был период a, а для дисперсионного соотношения период $\frac{2\pi}{a}$.

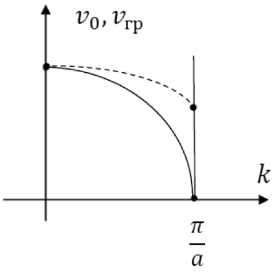

Рис. 2.10

Теперь рассмотрим фазовую и групповую скорость, которые должны быть у волны.

$$v_{гр} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \omega_0\, a \cos \frac{ka}{2}\,,$$

$$v_{ф} = \frac{\omega}{k} = 2\omega_0\, \frac{a}{2}\, \frac{\sin \frac{ka}{2}}{\frac{ka}{2}}\,.$$

Заметим, что разным k может соответствовать одна и та же частота ω. То есть разным длинам волн может соответствовать одно и то же смещение.

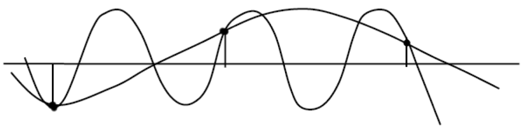

Рис. 2.11

Пример, когда для поперечного смещения, разным длинам волн соответствует одно и то же смещение.

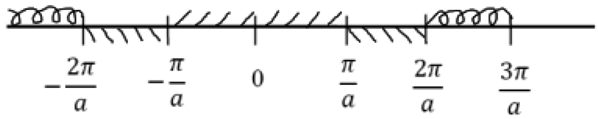

Рис. 2.12

Период, в котором лежат все физически различные величины, **называется зоной Брилюэна**.

Возбуждение колебаний с частотой больше, чем $2\omega_0$, невозможно.

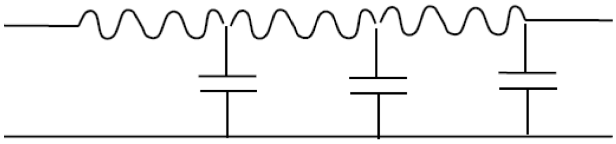

Рис. 2.13

Рассмотрим электромеханическую аналогию. Это фильтр низких частот, который пропускает частоты от нуля, до максимальной.

Если мы изменим каждый второй шарик, то период системы увеличится в два раза. Тогда вместо одного уравнения нам придется использовать два (для тяжелого и для легкого), а вместо линейного уравнения для ω, получим квадратное, которое имеет два физически различных решения.