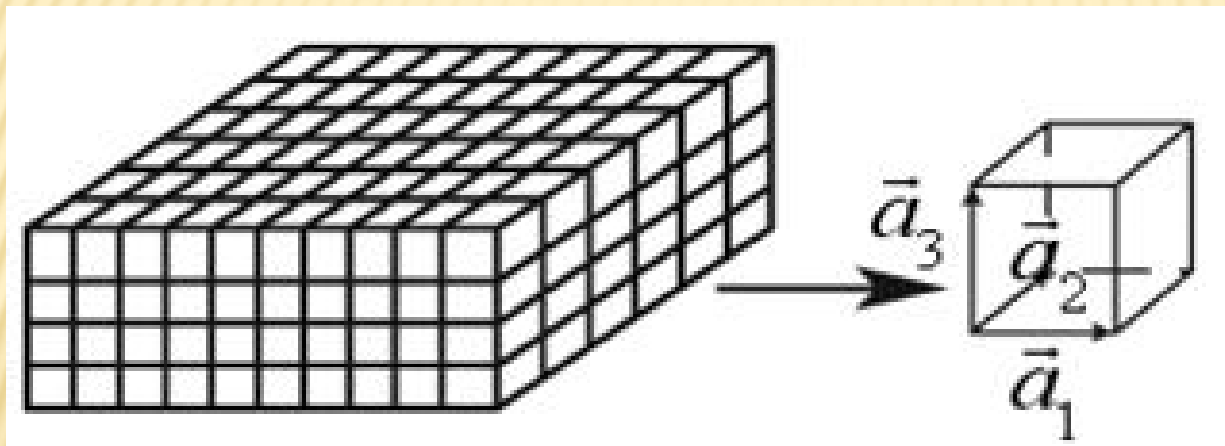


Лекция 3. Кристаллическая симметрия, элементарная ячейка. Одно- и многоатомные кристаллы. Примеры одномерных кристаллов. Система уравнений движения атомов элементарной ячейки. Квазиволновой вектор.

Кристаллический образец может быть представлен в общем случае как некий косоугольный параллелепипед.



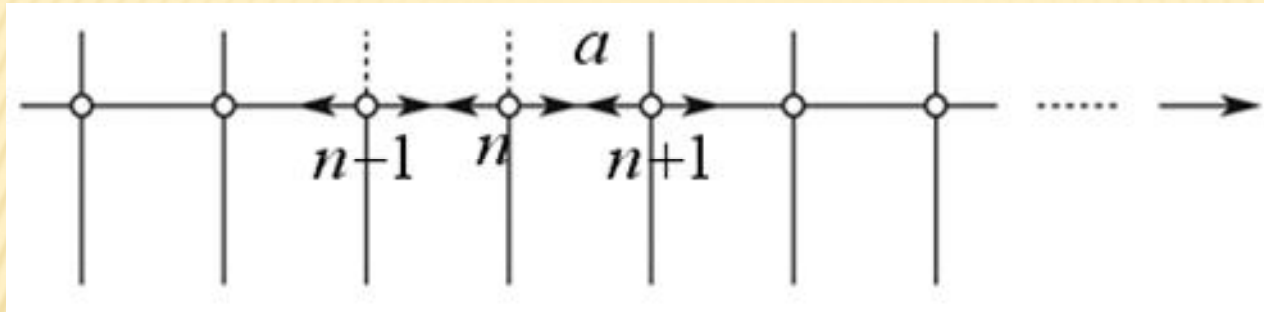
Элементарная ячейка геометрически абсолютно подобна исходному кристаллу.

То есть, существуют три семейства непараллельных плоскостей, которые можно провести через эквивалентно расположенные атомы.

Кристалл обладает трансляционной симметрией - можно всегда переставить любые две элементарные ячейки.

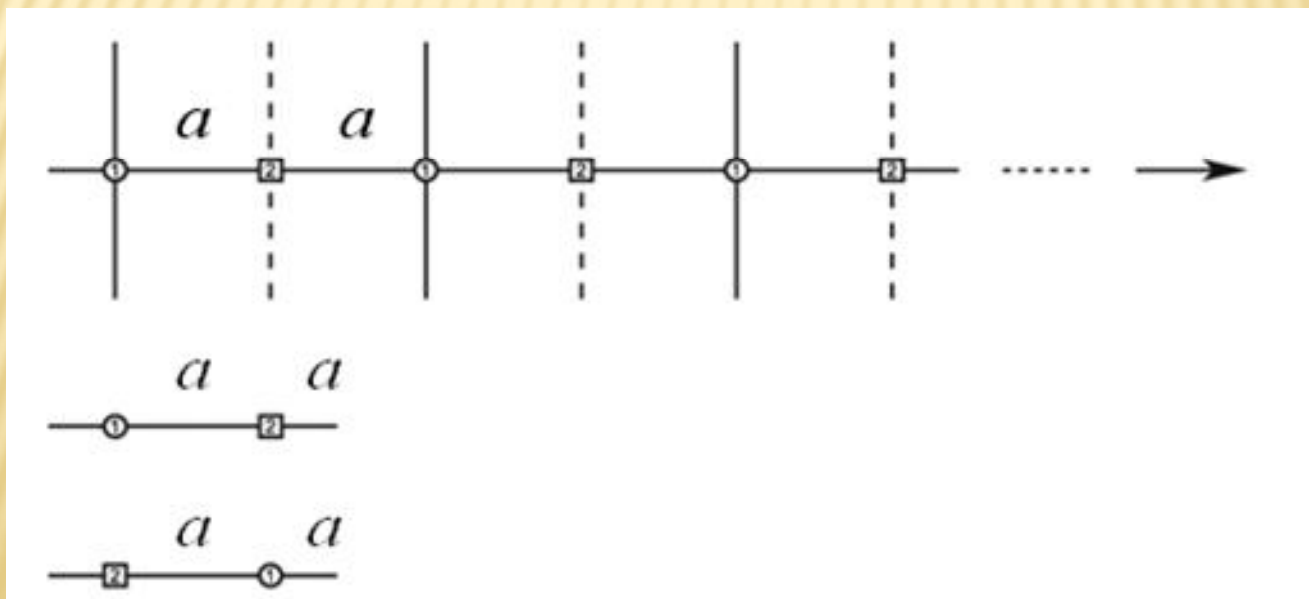
Размер и вид электронной оболочки неизменны и задаются природой. А вот выбор размера и ориентации базисных векторов $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ в некоторой степени произволен. Предположим, например, что некоторая точка структуры есть центр симметрии (следовательно, и все эквивалентные точки обладают этим свойством). Такую точку удобно выбрать в качестве центра ячейки. Можно предложить регулярный прием построения ячеек, центрированных таким образом, так называемых ячеек *Вигнера – Зейтца*. Из выбранного центра нужно провести векторы трансляций к ближайшим эквивалентным узлам решетки; затем построить плоскости, перпендикулярные этим векторам и проходящие через их середину. Тогда область, которую ограничат все такие плоскости, будет, очевидно элементарной ячейкой. Все точки этой области лежат ближе к выбранному центру, чем к любому другому узлу решетки. Элементарная ячейка может содержать один или более атомов. Если она содержит только один атом, мы помещаем его в узел решетки. Такая структура называется *решеткой Бравэ*.

Размер электронной оболочки и ориентация базисных векторов $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ неизменны и задаются природой.



Если бесконечную цепочку сдвинуть (“продернуть”) на целое число a , то ничего не изменится.

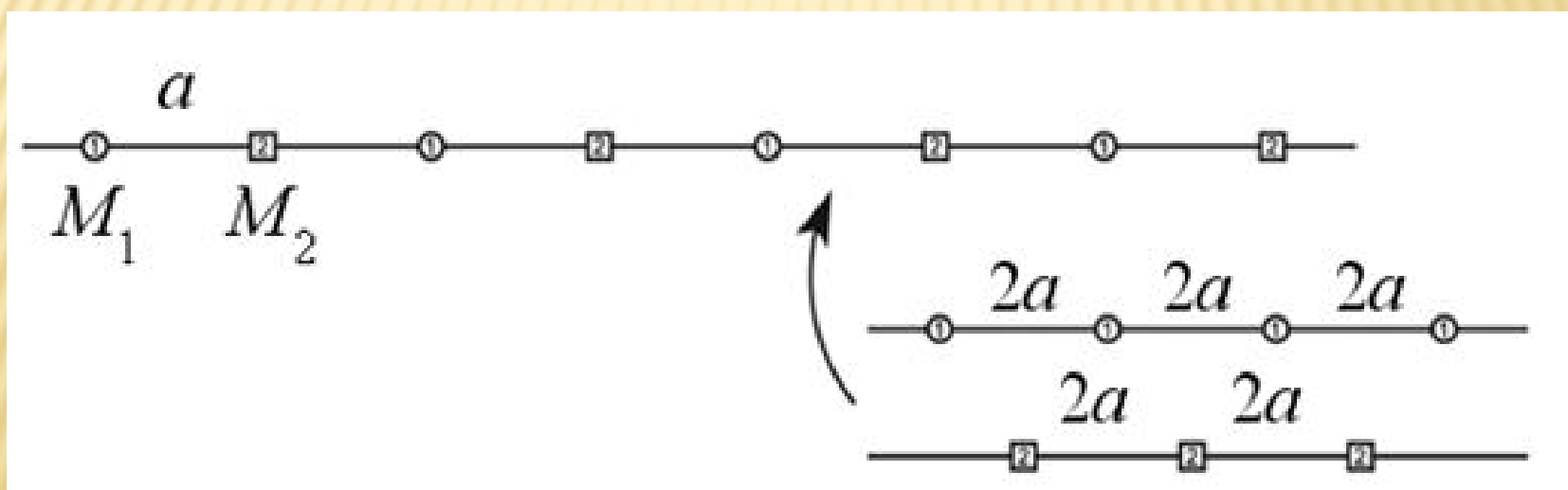
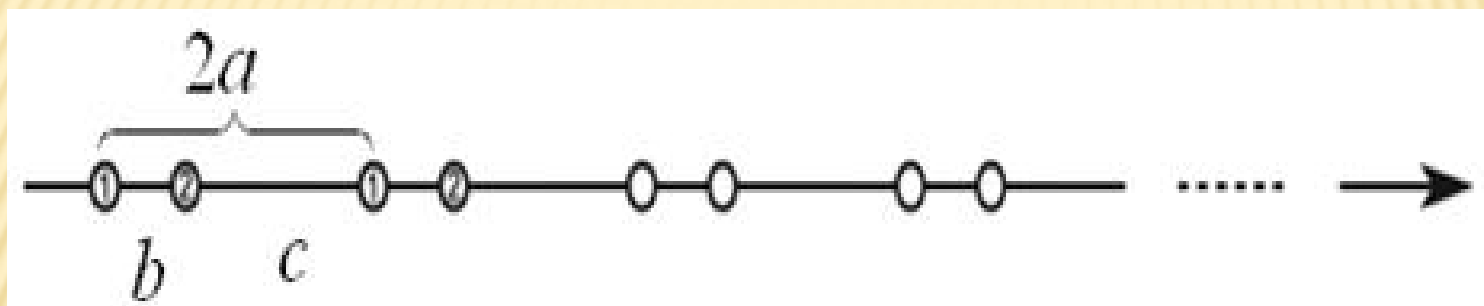
На одну ячейку приходится один атом \Rightarrow кристалл одноатомный.



Теперь продергивать надо на расстояние, кратное $2a$

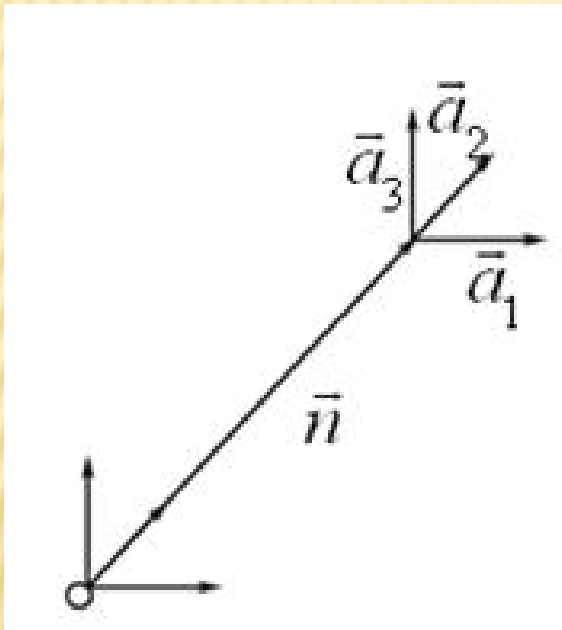
Выбор элементарных ячеек может быть неоднозначным. Однако геометрическая форма элементарной ячейки не изменилась. Это двухатомный кристалл.

Аналогично можно построить цепочки из g атомов. Сейчас известно до $g=15$.

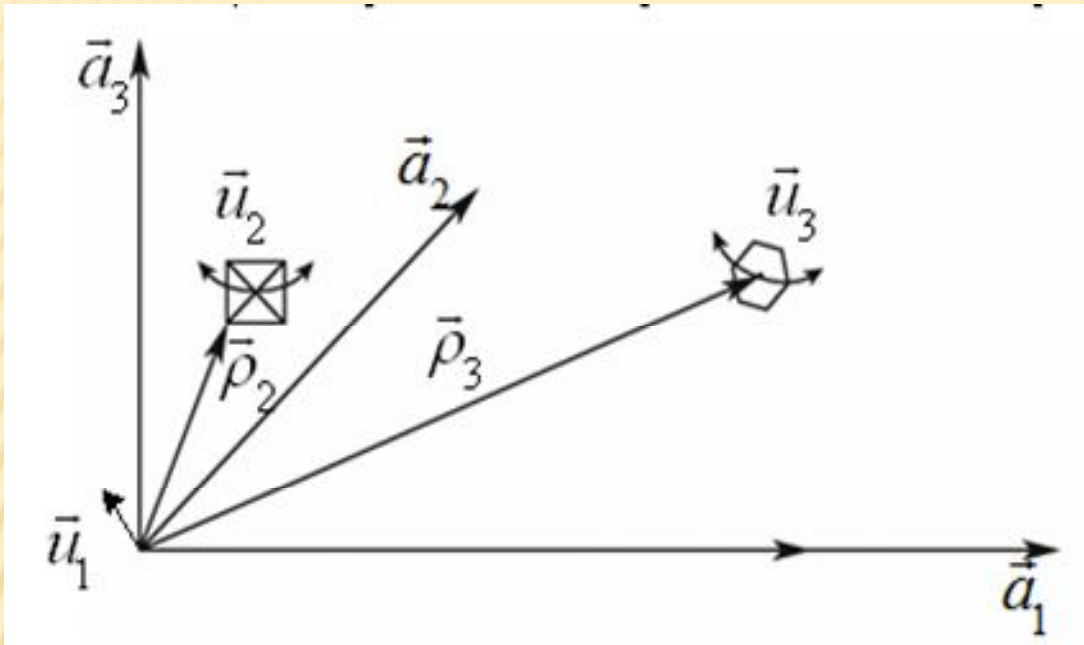


Все многоатомные кристаллы могут быть представлены как вложения (последовательное) кристаллов.

Если в элементарной ячейке d разных атомов, то ячейка d -атомная, и ее можно образовать последовательным вложением d кристаллов с отслеживанием порядка расположения.



$\vec{n} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$; $n_\alpha = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ - в зависимости от положения начала отсчета (если начало отсчета расположено в вершине кристалла, то n_α -положительная). Вектора \vec{n} задают вершины всех элементарных ячеек.



$$|\vec{\rho}_l| < a_\alpha \text{ (внутри!).}$$

$$\vec{\rho}_1 = 0$$

$$\vec{\rho}_2 \neq 0$$

$$\vec{\rho}_3 \neq 0$$

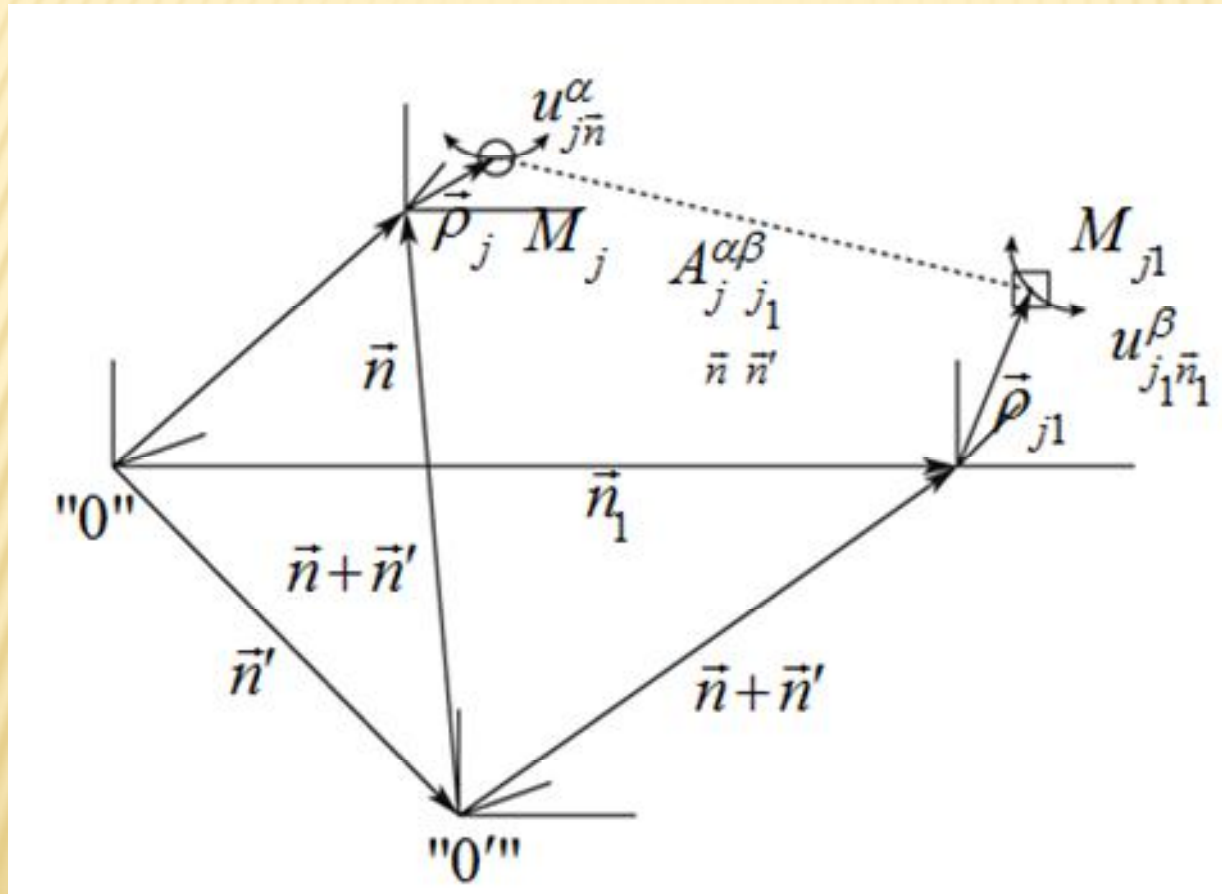
Мгновенное положение каждого атома в решетке будет задаваться двумя индексами.

$$\vec{R}_{j\bar{n}} = \underbrace{(\vec{n} + \vec{\rho}_j)}_{\vec{R}_{j\bar{n}}^{(0)}} + \vec{U}_{j\bar{n}}, \text{ где } \vec{U}_{j\bar{n}} \text{ - колебания вокруг положения равновесия.}$$

$$M_n \ddot{U}_{j\vec{n}}^\alpha = - \sum_{n_1} A_{nn_1}^{\alpha\beta} U_{n_1}^\beta \quad \text{“расселяем” атомы по ячейкам, а затем внутри них } \vec{n}, \vec{n}_1 -$$

нумеруют $M_n \ddot{U}_{j\vec{n}}^\alpha = - \sum_{j_1, \vec{n}_1} A_{j\vec{n}, j_1 \vec{n}_1}^{\alpha\beta} U_{j_1 \vec{n}_1}^\beta$ ячейки; j, j_1 - атомы.

Все ячейки абсолютно идентичны. Переместим "0" \rightarrow "0'",



$$M_j \ddot{U}_j^\alpha(\vec{n}_1 + \vec{n}) = - \sum_{\vec{j}_1, \vec{n}_1} A_{j\vec{j}_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} + \vec{n}', \vec{n}_1 + \vec{n}') U_{j_1}^\beta(\vec{n}_1 + \vec{n}') , \text{ т.е. мы}$$

поменяли номера атомов, а это неважно.

Извилистая силовая линия никак не зависит от начала отсчета $\Rightarrow A_{\frac{j\vec{j}_1}{\vec{n}\vec{n}_1}}^{\alpha\beta} \equiv A_{\frac{j\vec{j}_1}{(\vec{n}+\vec{n}')(\vec{n}_1+\vec{n}')}}^{\alpha\beta}$

$\Rightarrow A_{\frac{j\vec{j}_1}{\vec{n}\vec{n}_1}}^{\alpha\beta} \equiv A_{j\vec{j}_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1)$, (где $(\vec{n} - \vec{n}_1)$ - аргумент)

Это что-то вроде коэффициента жесткости; каким бы не было \vec{n}' , A- одинаковое.

Таким образом, мы получили две системы уравнений с одинаковыми коэффициентами \Rightarrow решения могут отличаться только в фазе. Это отличие вызвано перенумерацией ячеек.

Ищем решение в виде : $U_{j\vec{n}}^\alpha(t) = V_{j\vec{n}}^\alpha e^{-i\omega t}$. Всю зависимость от \vec{n} предполагаем “сидящей”

в фазе: $U_{j\vec{n}}^\alpha(t) = V_{j\vec{n}}^\alpha e^{-i\omega t} = W_j^\alpha e^{i\vec{f}\vec{n}} e^{-i\omega t}$. Чтобы это всегда была фаза, $(\vec{f}\vec{n})$ должно быть

действительным.

$$U_{j(\vec{n}+\vec{n}')}^\alpha = W_j^\alpha e^{i\vec{f}(\vec{n}+\vec{n}')} e^{-i\omega t} = e^{i\vec{f}\vec{n}'} \left(W_j^\alpha e^{i\vec{f}\vec{n}} e^{-i\omega t} \right) = e^{i\vec{f}\vec{n}'} U_{j\vec{n}}^\alpha \quad \text{Подставим в исходную систему :}$$

$$M_j W_j^\alpha e^{i\vec{f}\vec{n}} (+\omega^2 e^{-i\omega t}) = + \sum_{j_1 n_1} A_{jj_1}^{\alpha\beta} (\vec{n} - \vec{n}_1) W_{j_1}^\beta e^{i\vec{f}\vec{n}_1} e^{-i\omega t}, \quad \text{домножаем на } e^{-i\vec{f}\vec{n}}, \text{ получим :}$$

$$\omega^2 M_j W_j^\alpha = \sum_{j_1} \left\{ \underbrace{A_{jj_1}^{\alpha\beta} (\vec{n} - \vec{n}_1) e^{-i\vec{f}(\vec{n}-\vec{n}_1)}}_* \right\} W_{j_1}^\beta = \sum_{j_1} \left\{ \underbrace{\sum_{\vec{n}_2} A_{jj_1}^{\alpha\beta} (\vec{n}_2) e^{-i\vec{f}\vec{n}_2}}_{**} \right\} W_{j_1}^\beta, \quad \text{где * - здесь есть}$$

суммирование по всем элементарным ячейкам, в том числе $\vec{n}_1 = \vec{n} \Rightarrow$ выбор нуля

неважен, и зависимость от \vec{n} исчезает ; ** - здесь переменная \vec{n} лишь поменяет местами

слагаемые в сумме. Переобозначим $W_j^\alpha = \frac{l_j^\alpha}{\sqrt{M_j}}$ и поделим на $\sqrt{M_j}$:

$$\omega^2 l_j^\alpha = \sum_{j_1} C_{jj_1}^{\alpha\beta} (\vec{f}) l_{j_1}^\beta$$

$$C_{j_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) = \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_1}}} \sum_{\vec{n}_1} A_{j_1}^{\alpha\beta}(\vec{n} - \vec{n}_1) e^{-i\vec{f}(\vec{n} - \vec{n}_1)} \equiv \frac{1}{\sqrt{M_j M_{j_1}}} \sum_{\vec{n}} A_{j_1}^{\alpha\beta}(\vec{n}) e^{-i\vec{f}\vec{n}}, \text{ таким образом}$$

$$\omega^2 e_j^\alpha(\vec{f}) = \sum_j C_{j_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) l_{j_1}^\beta(\vec{f}) - \text{ и решения тоже зависят от вспомогательного вектора } \vec{f}.$$

$$\sum_{j_1} \left\{ \omega^2(\vec{f}) \delta^{\alpha\beta} \delta_{j_1} - C_{j_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) \right\} l_{j_1}^\beta(\vec{f}) = 0; \quad \begin{matrix} \alpha, \beta = 1, \dots, d \\ j, j_1 = 1, 2, \dots, g \end{matrix}, \quad g - \text{ полное число атомов в}$$

ячейке. $(\alpha_j) \times (\beta_{j_1}) = dg \times dg$, $(\alpha_j - \text{уравнений}, \beta_{j_1} - \text{неизвестных})$

- гораздо меньше, чем было раньше $(d*N)$. Отличие на 23 порядка, если $g=15$, уравнений,

dg – число колебаний степеней свободы элементарной ячейки.

Используем теорему Крамера : $\det \left\| \omega^2(\vec{f}) \delta^{\alpha\beta} \delta_{j_1} - C_{j_1}^{\alpha\beta}(\vec{f}) \right\| = 0$. Отсюда получим

$\omega_s^2(\vec{f}), S=1, \dots, d, d+1, \dots, dg$; ω_s^2 положительны и, в общем случае, разные.

