

## Неделя 1. Колебания решётки, фононы.

Здесь приводятся решения задач для разбора на семинаре для лекционного потока ФОПФ, 6 семестр, 2017-2018 уч.год. О замеченных опечатках, ошибках и неточностях просьба сообщать В.Н.Глазкову [vglazkov@yandex.ru](mailto:vglazkov@yandex.ru)

## Оглавление

Задача 2.1.....	1
Задача Т.1.1.....	2
Задача 2.16 .....	4
Задача Т.1.2.....	5

### Задача 2.1

Рассматривая атомы, из которых построены кристаллические решётки<sup>1</sup>, как твёрдые шары, найти плотность упаковки (т. е. заполненную часть элементарного куба) для простой, гранецентрированной и объёмноцентрированной кубических решёток.

Решение:

Объём элементарного куба  $V_{cell} = a^3$ , в простой кубической решётке приходится один атом на кубическую ячейку, в ГЦК — четыре атома на куб, в ОЦК — два атома на куб.

Максимальные радиусы шаров «до соприкосновения»:  $r = \frac{a}{2}; \frac{a}{2\sqrt{2}}; \frac{\sqrt{3}a}{4}$  для простой, ГЦК и ОЦК решёток, соответственно.

Далее для фактора заполнения

$$\xi = \frac{N \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \begin{cases} \frac{\pi}{6} \approx 0.524 \text{ для простой} \\ \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.740 \text{ для ГЦК} \\ \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 0.680 \text{ для ОЦК} \end{cases},$$

где  $N$  — число атомов в кубической ячейке.

Дополнительно:

1. Такой же фактор заполнения 0.740 получается для гексагональной плотной упаковки. См. [https://en.wikipedia.org/wiki/Close-packing\\_of\\_equal\\_spheres](https://en.wikipedia.org/wiki/Close-packing_of_equal_spheres)
2. Для структуры алмаза (ГЦК с базисом из двух атомов (0;0;0) и (1/4;1/4;1/4)) в модели

<sup>1</sup> В данной задаче подразумевается наличие всего одного сорта атомов (базис из одного атома). Поэтому расположение атомов в кристаллической структуре совпадает с пространственным расположением узлов кристаллической решётки. В общем случае — кристаллическая решётка является математической абстракцией, а пространственное расположение атомов (кристаллическая структура) получается размножением по узлам решётки группы атомов (кристаллографического базиса).

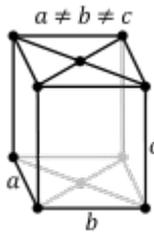
плотно упакованных шаров  $r = \frac{\sqrt{3}a}{8}$  и  $\xi = \frac{\sqrt{3}\pi}{16} \approx 0.340$ . То есть «с точки зрения упаковки» алмаз оказывается очень «рыхлым», и его твёрдость обусловлена не плотной упаковкой атомов, а очень эффективно сформированными межатомными связями.

### Задача Т.1.1

Для базоцентрированной ромбической решётки с параметрами решётки  $a, b=2a, c$  построить обратную решётку, выделить первую зону Бриллюэна, найти объём первой зоны Бриллюэна и сравнить с объёмом элементарной ячейки исходной ромбической решётки.

Комментарий: цель задачи — показать, что геометрия первой зоны Бриллюэна даже в казалось бы геометрически простых решётках может оказаться нетривиальной.

Решение:



Элементарная ячейка исходной решётки представляет собой прямоугольную призму с отношением сторон основания 1:2 и с центрированными основаниями. Объём элементарной ячейки исходной ромбической решётки в обычном пространстве:  $V_r = 2a^2c$ .

Вводим базис  $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}$  вдоль  $a, b, c$  осей, соответственно.

Базоцентрированная решётка непримитивная — для построения первой зоны Бриллюэна по определению необходимо перейти к примитивной решётке.<sup>2</sup>

Переход к примитивной решётке неоднозначен, но это не влияет на конечный результат. Это можно сделать, например, заменив одну из трансляций в плоскости основания на вектор в центр основания:  $\vec{b}' = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})$ . Объём примитивной ячейки  $V_{r, прим} = \frac{1}{2}V_r = a^2c$  (вдвое меньше, чем исходной).

Вектора обратной решётки, построенные для примитивной ячейки:

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{V_{r, прим}} [\vec{b}' \times \vec{c}] = \frac{\pi}{a} (2\vec{x} - \vec{y})$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{a} \vec{y}$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi}{c} \vec{z}$$

Отсюда сразу объём элементарной ячейки для обратной решётки, по определению равный объёму первой зоны Бриллюэна, равен  $V_k = V_{1 з.Бр.} = (\vec{a}^* \cdot [\vec{b}^* \times \vec{c}^*]) = \frac{(2\pi)^3}{a^2c} = \frac{(2\pi)^3}{V_{r, прим}} = 2 \frac{(2\pi)^3}{V_r}$ .

Множитель 2 здесь связан с тем, что объём базоцентрированной ромбической элементарной ячейки вдвое больше объёма примитивной ячейки, для примитивной ячейки всегда верно

<sup>2</sup> Саму обратную решётку можно построить и для примитивной решётки, и для исходной ромбической. Далее рассуждения идут для построения обратной решётки примитивной решётки, необходимой для нахождения первой зоны Бриллюэна. К обратной решётке исходной ромбической решётки мы вернёмся в конце решения.

соотношение  $V_{\text{1з.Бр.}} = \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{прим}}}$ .

Так как  $\vec{c}^* \perp \vec{a}^*, \vec{b}^*$ , то элементарная ячейка обратной решётки, построенная на векторах трансляции обратной решётки, будет иметь вид прямоугольной призмы.

Для построения первой зоны Бриллюэна пользуемся (по определению) построением ячейки Вигнера-Зейтца. Построение в направлении оси  $Z$  тривиально: границы первой зоны Бриллюэна лежат на расстоянии  $\pm c^*/2$  от плоскости  $XY$ : это положения срединных перпендикуляров к соседним вдоль направления  $Z$  узлам. В рассматриваемом случае из-за ортогональности  $\vec{c}^* \perp \vec{a}^*, \vec{b}^*$  срединные перпендикуляры к другим узлам вне плоскости  $XY$  (смещённым на трансляции типа  $\vec{a}^*, \vec{b}^*$ ) не будут «срезать» углы ячейки Вигнера-Зейца. В этом можно убедиться либо геометрическим анализом, либо если заметить, что объём первой зоны Бриллюэна (найденный ранее) равен (из ортогональности) произведению высоты призмы  $|\vec{c}^*|$  на площадь основания  $\|\vec{a}^* \times \vec{b}^*\|$ , так как площадь этого основания будет равна по построению площади сечения ячейки Вигнера-Зейца плоскостью  $XY$ , то никаких углов этой призмы в направлении вектора  $\vec{c}^*$  «срезать» не надо.

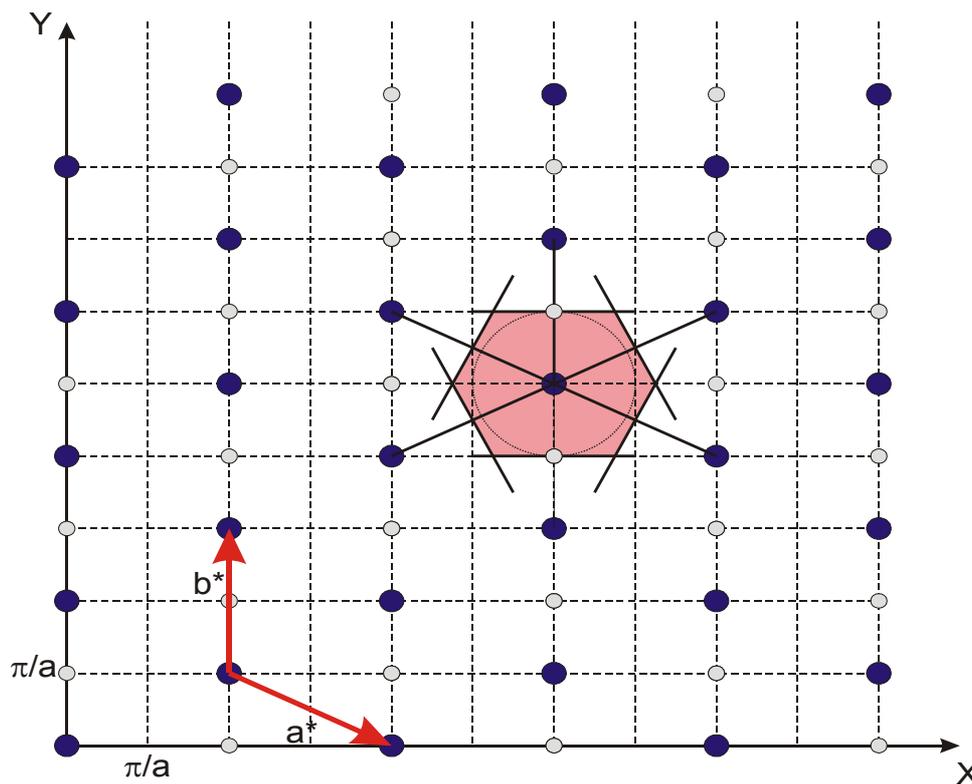


Рисунок 1: К решению задачи Т.1.1. Обратная решётка в плоскости  $XY$  и проекция первой зоны Бриллюэна на эту плоскость. Синие кружки - обратная решётка для примитивной элементарной ячейки. Серые кружки - дополнительные узлы обратной решётки при построении по непримитивной элементарной ячейке. Показаны вектора обратной решётки для построения по примитивной ячейке. Красным фоном показана первая зона Бриллюэна, построенная как ячейка Вигнера-Зейтца. Пунктирный круг в первой зоне Бриллюэна построен, чтобы подчеркнуть неправильность получающегося шестиугольника.

Интерес представляет построение сечения первой зоны Бриллюэна в плоскости ХУ. Построение представлено на рисунке 1. Первая зона Бриллюэна для исходно «прямоугольной» структуры имеет вид прямоугольной призмы с основанием в форме неправильного шестиугольника.

Дополнительно можно построить обратную решётку по исходной непримитивной решётке. В этой обратной решётке окажется вдвое больше узлов. Формально для изменения волнового вектора падающей волны с такими значениями будет выполнено условие дифракции  $\Delta \vec{k} = \vec{G}$  — однако интенсивность такой дифракции окажется нулевой при учёте структурного фактора элементарной ячейки (т.н. запрещённые отражения).

## Задача 2.16

Найти импульс одномерной цепочки из  $N$  атомов с массой  $M$ , в которой возбуждена волна с волновым вектором  $K$ . Используя периодическое граничное условие показать, что этот импульс равен нулю для всех  $K \neq 0$ . Пояснить физический смысл полученного результата.

Комментарий:

Задача разобрана в задачнике и в Киттеле. Разбор в задачнике корректный. Ниже приводится краткое решение.

Решение:

Периодическое граничное условие означает, что, если дополнить нашу цепочку атомов «нулевым атомом», то смещение атомов с  $i=0$  и  $i=N$  одинаково. Фактически, это означает «сворачивание» цепочки в кольцо, так что  $N$ -ый атом взаимодействует теперь с первым.

Предполагая, что смещения атомов в такой волне  $u_n = A e^{i(Kan - \omega t)}$ , получаем из граничного условия  $u_0 = u_N$ . Это даёт условие  $KaN = 2\pi p$ , где  $p$  — целое и  $a$  — расстояние между атомами в цепочке, которое выделяет  $N$  разрешенных значений вида  $K = 0; \frac{2\pi}{Na}; \frac{2\pi}{Na} \times 2; \frac{2\pi}{Na} \times 3 \dots$  (до  $K = \frac{2\pi(N-1)}{Na}$ , в этой задаче удобно не сводить все волновые вектора в первую зону Бриллюэна).

Смещения атомов в такой волне  $u_n = A e^{i(Kan - \omega t)}$ , мгновенные скорости  $v_n = -i\omega A e^{i(Kan - \omega t)}$ . Полный импульс такой цепочки

$$P = \sum_1^N p_n = -i\omega M A e^{-i\omega t} \sum_1^N e^{iKan} = -i\omega M A e^{i(Ka - \omega t)} \frac{1 - e^{iKa N}}{1 - e^{iKa}}$$
 (выполнено суммирование геометрической прогрессии).

С учётом граничных условий числитель дроби всегда нулевой.

Отдельным оказывается случай  $K=0$ . В этом случае в дроби получается неопределенности типа «ноль делить на ноль»,  $\lim_{K \rightarrow 0} \frac{1 - e^{iKa N}}{1 - e^{iKa}} = N$ . Однако и частота акустических фононов с  $K=0$  оказывается нулевой! Но можно заметить, что однородное ( $K=0$ ) и постоянное ( $\omega=0$ ) колебание по своему смыслу есть движение всех атомов

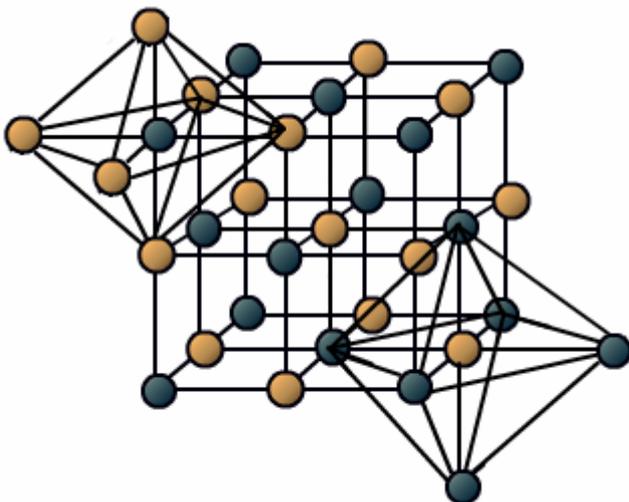
цепочки с постоянной скоростью  $u_n = Vt$ . Другими словами, нулевая частота означает отсутствие возвращающей силы при таких колебаниях и уравнения динамики в модели «шариков и пружинок» принимают вид  $\frac{d^2 u_n}{dt^2} = 0$  с решением типа  $u_n = Vt$ . В этом случае полный импульс цепочки получается  $P = M N V$ .

*Комментарий (В.Н.Глазков, личное мнение):* хотя решение в задачнике и Киттеле корректно, у задачи есть некоторое коварство. Её ответ (иногда интерпретируемый как нулевой импульс фонона) является следствием наложенных по условию периодических граничных условий. По ходу курса будут обсуждаться разные методы исследования фононных спектров (например, возбуждение фонона при рассеянии нейтрона) при которых кристаллу передаётся некоторый «настоящий» импульс, интерпретируемый как квазиимпульс возбуждаемой квазичастицы. При ударе молотком по концу длинного стержня импульс деформации, бегущий по стержню со скоростью звука, можно представить, как пакет фононов: и добрав до второго конца этот пакет может отдать свой импульс прислонённому к концу стержня шарiku. Отличие от задачи, очевидно, в граничных условиях. Во многих случаях эта «экзистенциальная проблема» снимается учётом ангармонизмов, приводящих к конечному времени жизни фонона. Например, при рассеянии нейтрона с излучением фонона испущенный фонон уносит «настоящий» импульс, но, пробежав свою длину пробега, он рассеивается, и после нескольких процессов рассеяния мы получим никуда не летящий равновесный газ фононов и опять можем говорить, что «у фононов нулевой импульс», а «импульс рассеяния передался кристаллу в целом».

## Задача Т.1.2

*Распространение продольных фононов вдоль главной диагонали элементарного куба в кристалле KBr (структура хлористого натрия) хорошо описывается моделью двухатомной одномерной цепочки. Найти скорость продольного звука, если минимальная частота оптических фононов в этом направлении составляет  $\Omega_{min} = 2.73 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$ . Ребро элементарного куба (расстояние между ионами одноимённого знака) составляет  $2a = 6.6 \text{ \AA}$ . В качестве периода цепочки следует брать расстояние между плоскостями одинаковых ионов, перпендикулярных главной диагонали куба.*

Решение:



В структуре NaCl (ГЦК, базис состоит из атома Na и атома Cl) вдоль главной диагонали элементарную ячейку пересекают шесть чередующихся плоскостей атомов разных сортов. Расстояние между плоскостями отличается от расстояния между атомами в этом направлении, соседние плоскости сдвинуты относительно друг друга.

Тогда период «цепочки плоскостей» равен расстоянию между двумя плоскостями

атомов одного типа, т.е.  $d = \sqrt{3}(2a)/3 = \frac{2a}{\sqrt{3}}$  .

Минимальная частота оптических фононов в используемой модели достигается на границе зоны Бриллюэна и равна  $\omega_{opt}(k = \pi/a) = \sqrt{\frac{2C}{M_K}}$  (используется масса более лёгкого атома).

Для скорости звука из длинноволнового предела для акустической ветви известно, что

$$s = d \sqrt{\frac{C}{2(M_K + M_{Br})}} .$$

Окончательно:

$$s = \frac{a}{\sqrt{3}} \Omega_{min} \sqrt{\frac{M_K}{M_K + M_{Br}}} \approx 2.98 \cdot 10^5 \text{ см/сек} .$$

*Комментарий:* Для вычислений можно заметить, что молярные массы калия и брома равны 39 г/моль и 80 г/моль, то есть подкоренное отношение масс даст с хорошей точностью  $1/\sqrt{3}$  после чего все вычисления делаются без калькулятора.