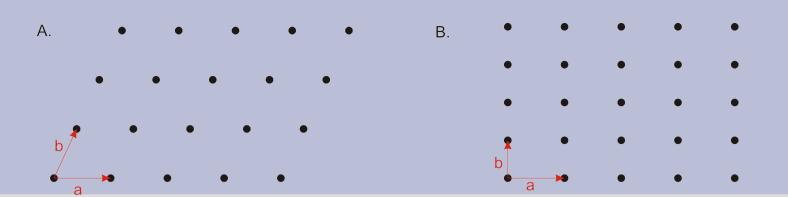
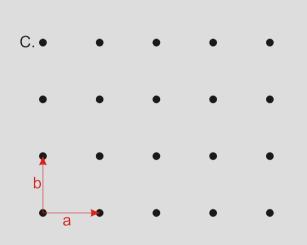
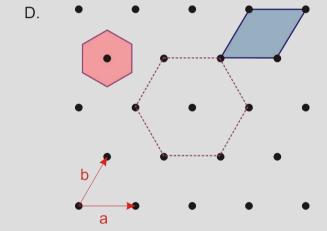
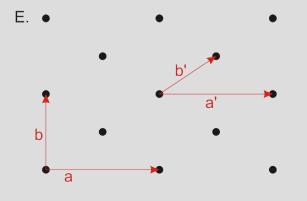


Квантовая макрофизика. Лекция 1. Структура и колебания кристаллических решёток.









Как зовут лектора....

Глазков Василий Николаевич, к.ф.-м.н., доц. МФТИ, с.н.с. ИФП им.П.Л.Капицы РАН

vglazkov@yandex.ru, glazkov@kapitza.ras.ru

Материалы к лекциям:

- сайт кафедры общей физики (раздел VI семестр)
- web-страница лектора http://www.kapitza.ras.ru/people/glazkov
- Yotube-канал кафедры: записи лекций, консультации к экзамену

Основная литература по курсу или

Какого Цвета Учебник

- <u>Ч.Киттель «Введение в физику твёрдого тела»</u>
- В.В.Шмидт «Введение в физику сверхпроводников»
- И.М.Халатников «Введение в теорию сверхтекучести»
- В.Я.Демиховский, Г.А.Вугальтер «Физика квантовых низкоразмерных структур»

По вопросам квантовой физики: Ландау и Лифшиц, том 3

Некоторые вопросы физики металлов: А.А.Абрикосов «Основы теории металлов»;

Методические пособия на сайте кафедры общей физики и кафедры теоретической физики.

Почему «квантовая макрофизика» (физика конденсированного состояния)?

«The rest is chemistry...» П.Дирак

Почему «квантовая макрофизика» (физика конденсированного состояния)?

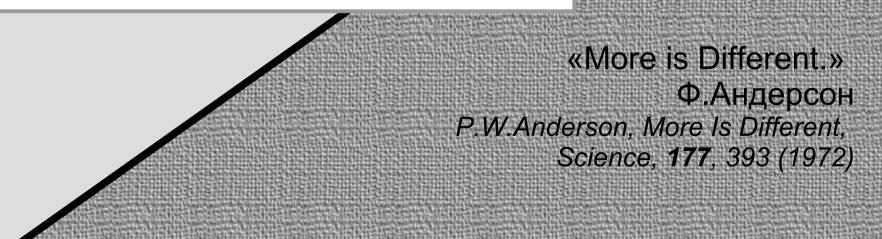
«The rest is chemistry...» П.Дирак

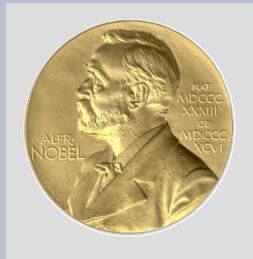
«More is Different.» Ф.Андерсон P.W.Anderson, More Is Different, Science, **177**, 393 (1972)

Почему «квантовая макрофизика» (физика конденсированного состояния)?

Новые явления, которые не сводятся к свойствам составляющих частиц:

- Спонтанное нарушение симметрии
- Квазичастицы, как универсальный язык описания многочастичных систем
- Универсальные для физики методы
- Технологии...



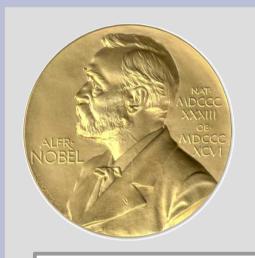


2000



2000

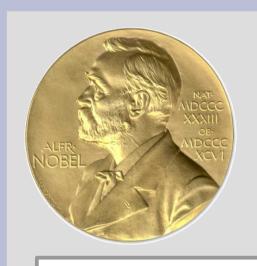
The Nobel Prize in Physics 2018 Gérard Mourou and Donna Strickland "for their method of generating high-intensity, ultra-short optical pulses"



2000

The Nobel Prize in Physics 2016
D. J. Thouless, F. D.M. Haldane and J. M. Kosterlitz
"for theoretical discoveries of topological phase transitions and topological phases of matter"

2018



The Mohal Prize in Physics 2016

D The Nobel Prize in Physics 2014 "fe Isamu Akasaki, Hiroshi Amano and Shuji Nakamura tra "for the invention of efficient blue light-emitting diodes which has enabled bright and energy-saving white light sources"

2014

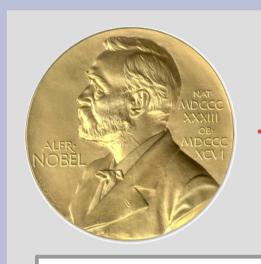


The Nobel Prize in Physics 2016

D The Nobel Prize in Physics 2014

"fe Isamu Akasaki. Hiroshi Amano and Shuii Nakamura

- tr: "f The Nobel Prize in Physics 2010
 - w Andre Geim and Konstantin Novoselov
 - w "for groundbreaking experiments regarding the two-dimensional material graphene"

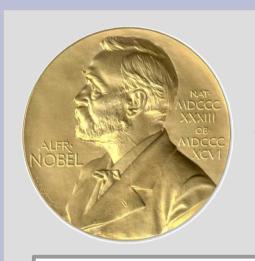


2010 2014 2016 2018

The Nobel Prize in Physics 2008

Charles Kuen Kao"for groundbreaking achievements concerning the transmission of light in fibers for optical communication"

W " Willard S. Boyle and George E. Smith "for the invention of an imaging semiconductor circuit – the CCD sensor"



2007 2008 2010 2016

The The Nobel Prize in Physics 2008

"for Isar Charles Kuen Kao"for groundbreaking achievements concerning the transmission of light

The Nobel Prize in Physics 2007

Albert Fert and Peter Grünberg

"for the discovery of Giant Magnetoresistance"



The Nobel Prize in Physics 2008

"for Isar Schievements concerning the transmission of light

The Nobel Prize in Physics 2007

The Nobel Prize in Physics 2003

Alexei A. Abrikosov, Vitaly L. Ginzburg and A. J. Leggett "for pioneering contributions to the theory of superconductors and superfluids"



000-2000

The Nobel Prize in Physics 2000

"for basic work on information and communication technology" Zhores I. Alferov and Herbert Kroemer

2003 2007 2010

2014

"for developing semiconductor heterostructures used in high-speedand opto-electronics"

Jack S. Kilby "for his part in the invention of the integrated circuit"

The Nobel Alexei A. Al supercondu

ha Nr

Вклад в современные технологии



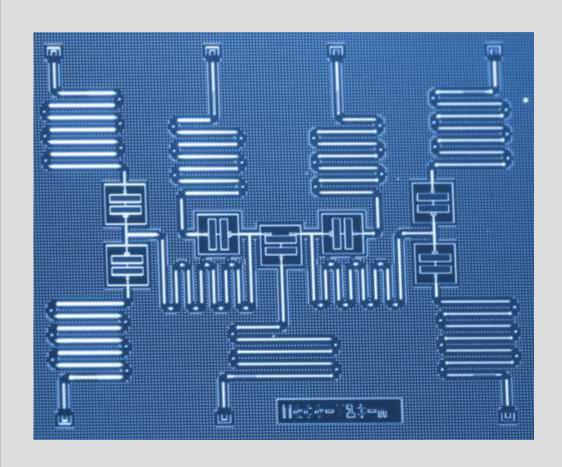
полупроводниковые технологии, минитюаризация элементной базы

Детекторы и «железо» сложных экспериментов



http://cms.web.cern.ch/news/superconducting-magnet

IBM 7 Qubit Device



Итак...

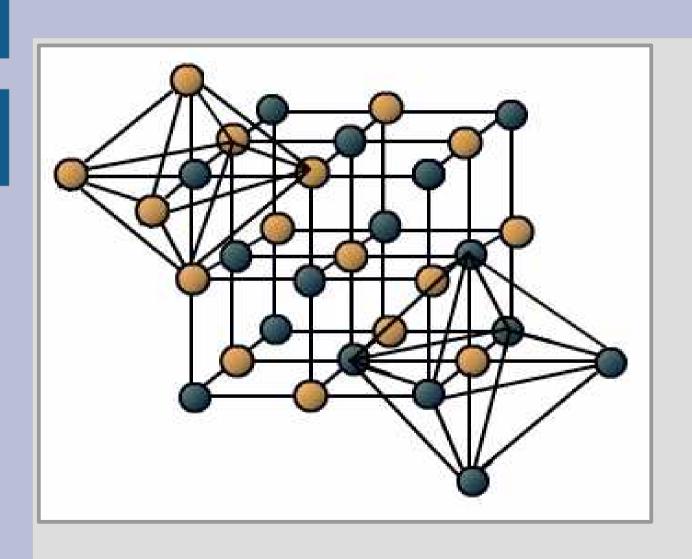
- Нетривиальные основные состояния
- Термодинамика систем многих тел, фазовые переходы
- Описание свойств систем многих тел на универсальном языке квазичастиц
- Возможность создания (экспериментального) систем с пространственной размерностью меньше 3

Примерный план:

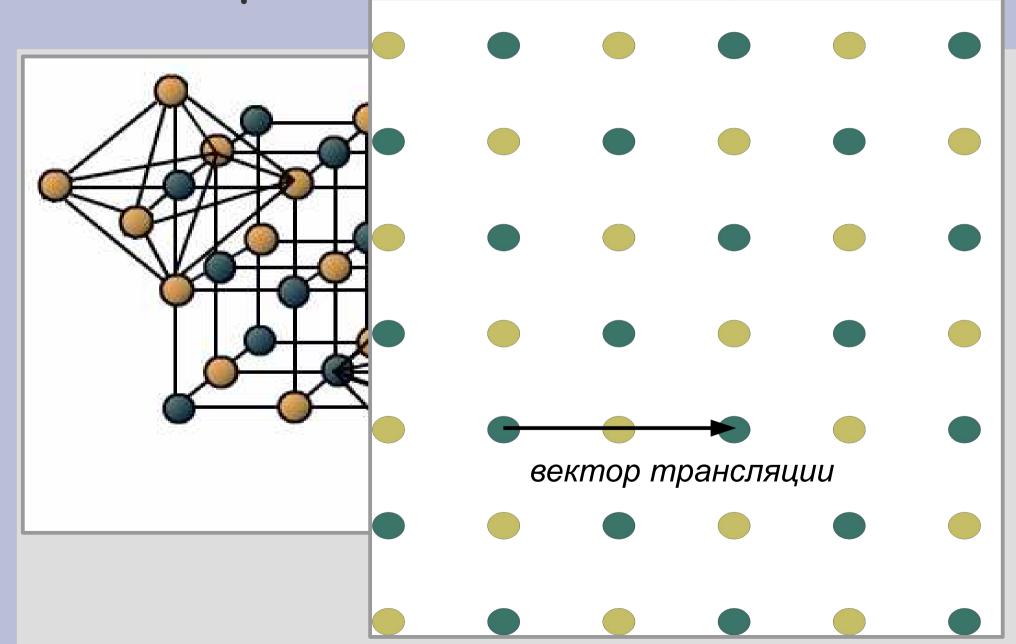
- ознакомление с языком этой области физики (кристаллы, колебания, движение частицы в кристалле)
- физика металлов и полупроводников
- физика низкоразмерных систем
- сверхтекучесть и сверхпроводимость
- магнетизм.

Часть 1. «Азбука кристаллографии»: структура, решётка, базис.

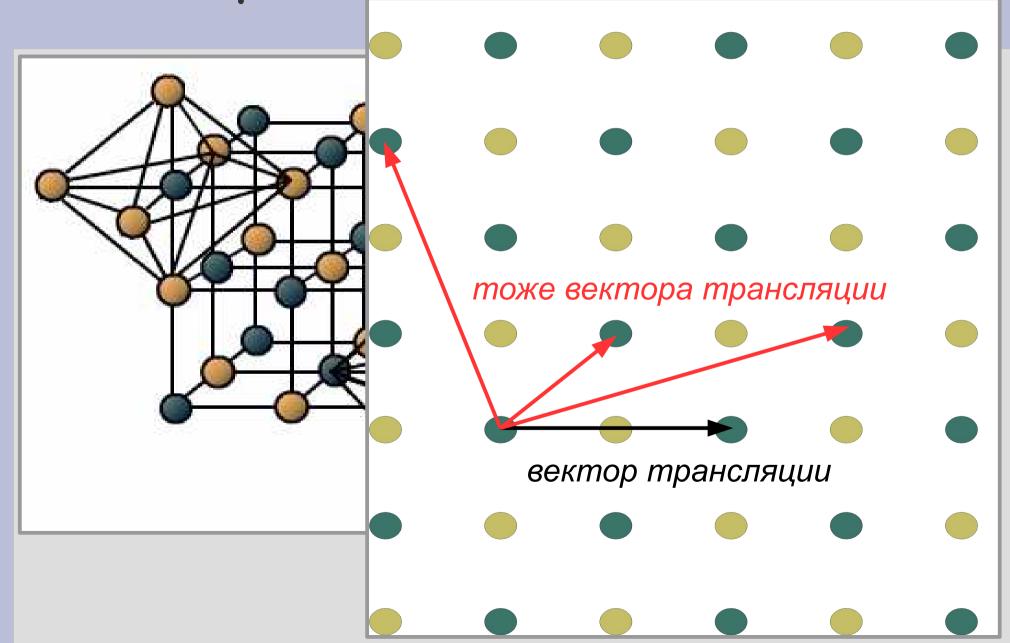
Кристаллическая структура



Трансляционная симметрия



Трансляционная симметрия



Решётка и базис

<u>Кристаллическая решётка</u> = ГМТ, получающихся применением трансляций к исходной точке.

$$\vec{r} = \vec{r_0} + n \vec{a} + m \vec{b} + p \vec{c}$$

Решётка и базис

<u>Кристаллическая решётка</u> = ГМТ, получающихся применением трансляций к исходной точке.

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + n \vec{a} + m \vec{b} + p \vec{c}$$

<u>Базис</u> (кристаллографический базис): группа атомов, применением к которой операций трансляции можно полностью восстановить пространственное расположение атомов в данном теле.

Решётка и базис

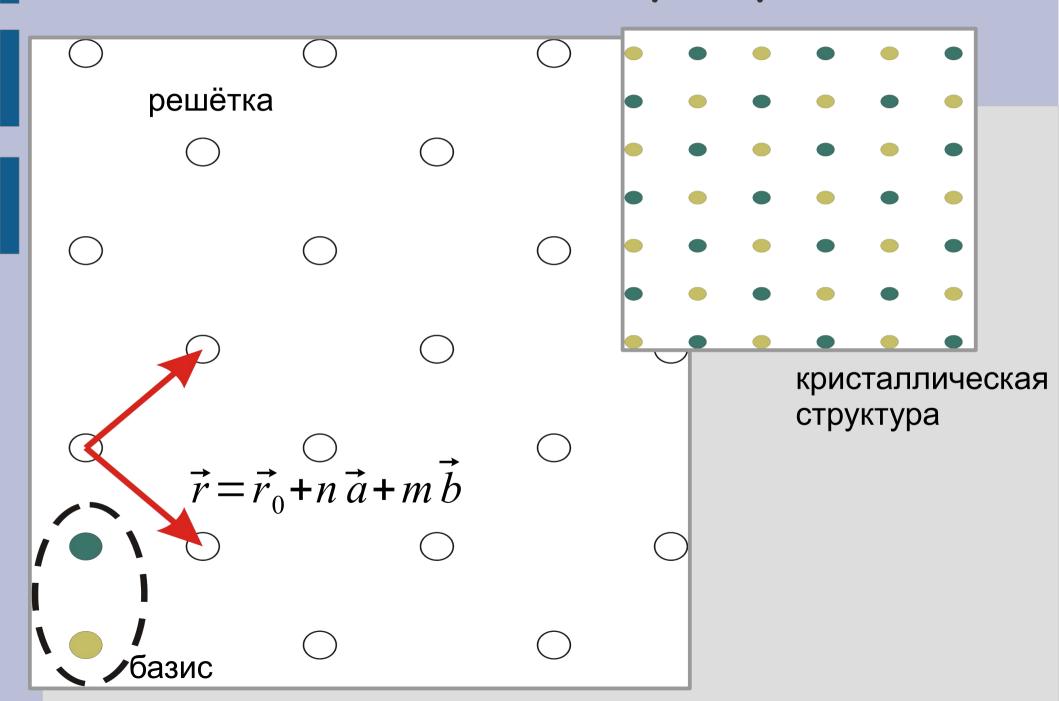
<u>Кристаллическая решётка</u> = ГМТ, получающихся применением трансляций к исходной точке.

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + n \vec{a} + m \vec{b} + p \vec{c}$$

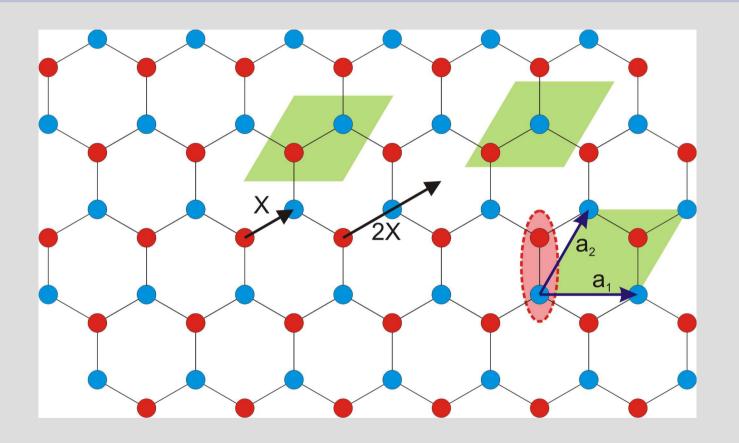
<u>Базис</u> (кристаллографический базис): группа атомов, применением к которой операций трансляции можно полностью восстановить пространственное расположение атомов в данном теле.

Кристаллическая структура=решетка+базис

Решетка и базис: пример 1

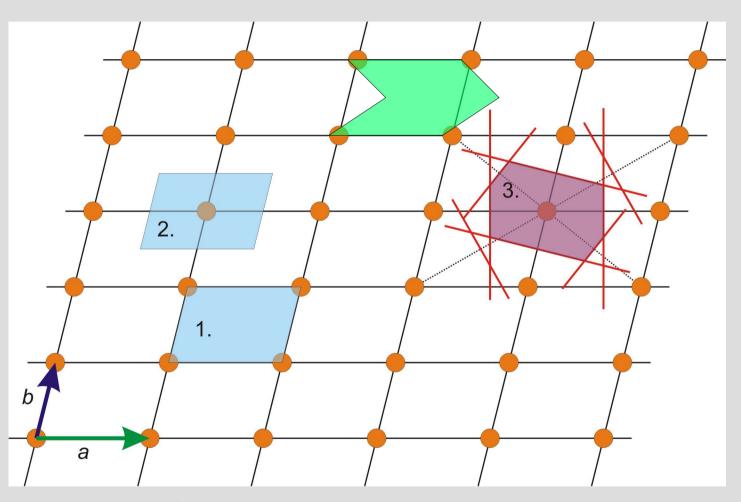


Решетка и базис: пример 2



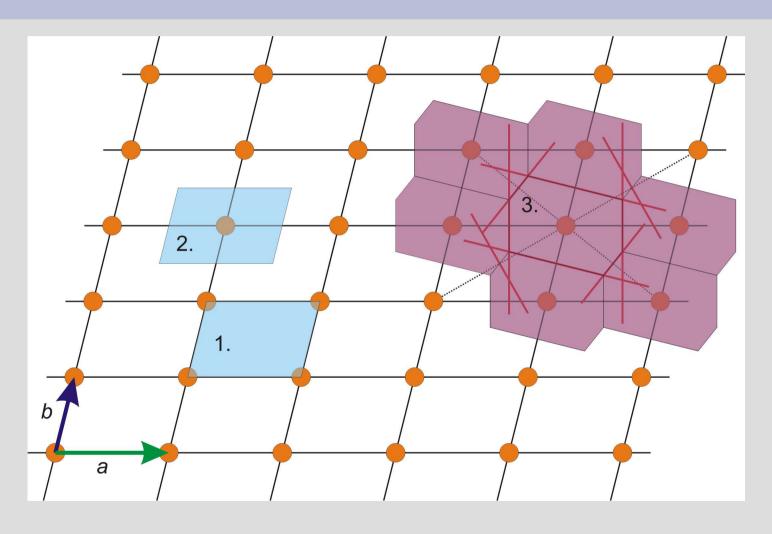
Структура «пчелиные соты» не описывается парой векторов трансляции, приходится выделять базис из двух атомов. Решётка «шестиугольной» структуры будет иметь вид сетки из ромбов. Элементарная ячейка — например один из отмеченных ромбов,

Элементарная ячейка.



Варианты выбора элементарной ячейки на двумерной решётке: 1 и 2 - построение на векторах трансляции с разным расположением элементарной ячейки относительно узлов решётки, 3 - построение ячейки Вигнера-Зейтца.

Элементарная ячейка.

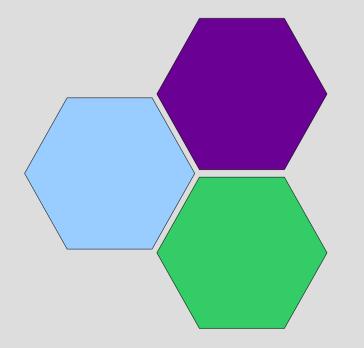


Мощение плоскости ячейкой Вигнера-Зейтца

Другие операции симметрии.

Кристаллы могут обладать и другими симметриями:

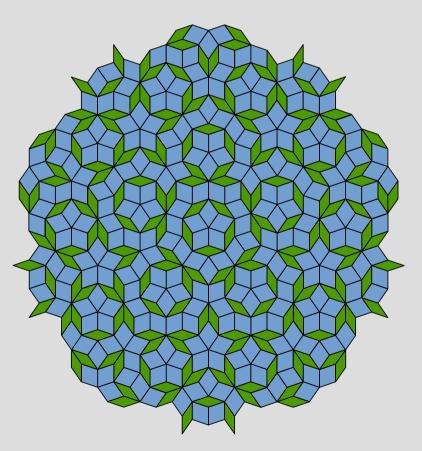
- инверсия,
- оси вращения,
- плоскости отражения.



Ho: Всего существует 230 пространственных групп симметрии.

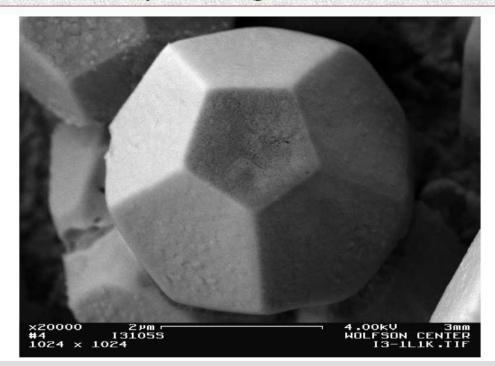
Сочетание с трансляциями накладывает ограничение: возможны только оси 2,3,4 и 6 порядка.

Квазикристаллы: есть ось 5 порядка, но нет трансляционной инвариантности



https://en.wikipedia.org/wiki/Penrose_tiling

A quasi-periodic crystal of the system Mg-Zn-Ce



Из слайдов нобелевской лекции Д.Шехтмана, С сайта http://www.nobelprize.org

И в результате получаем...









Естественная огранка часто отражает форму элементарно й ячейки и наличие осей симметрии

Естественная огранка кристаллов. С сайта Минералогического музея РАН. Верхний ряд: (слева) благородная шпинель, (справа) топаз. Нижний ряд: (слева) топаз, (справа) рутил.

А если кристалл растёт достаточно долго...

Это человек. И это не фотошоп.



Гигантские кристаллы гипса (селенит, структурная разновидность гипса, CaSO4·2H2O) из "Пещеры кристаллов" в шахтном комплексе Найка (Мексика). Фото из статьи в журнале National Geographic

Giant Crystal Cave Comes to Light , http://news.nationalgeographic.com/news/2007/04/photogalleries/giant-crystals-cave/index.html

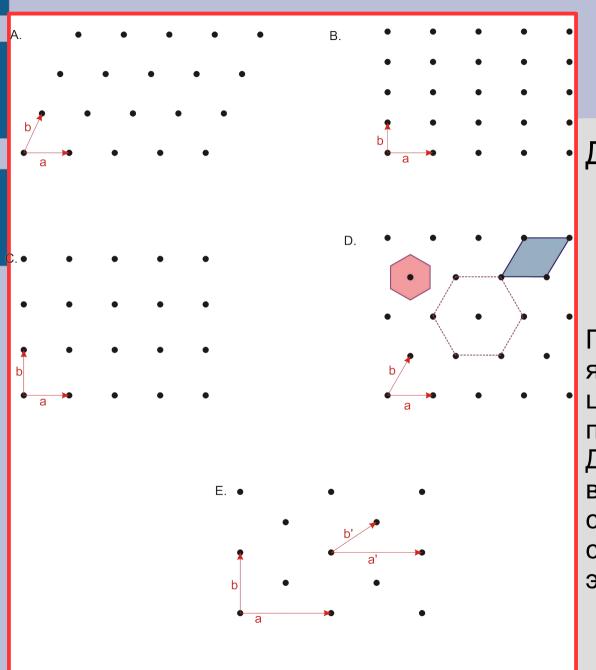
И в человеческих силах...





https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/iss/kap_5/illustr/i5_3_1.html

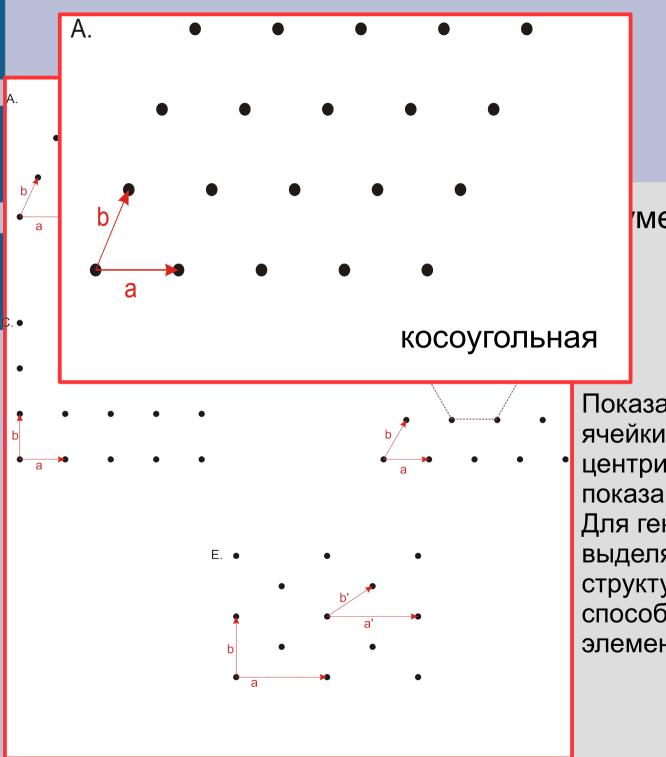
Классификация кристаллических решёток (решётки Браве)



2D

Двумерные решётки Браве:

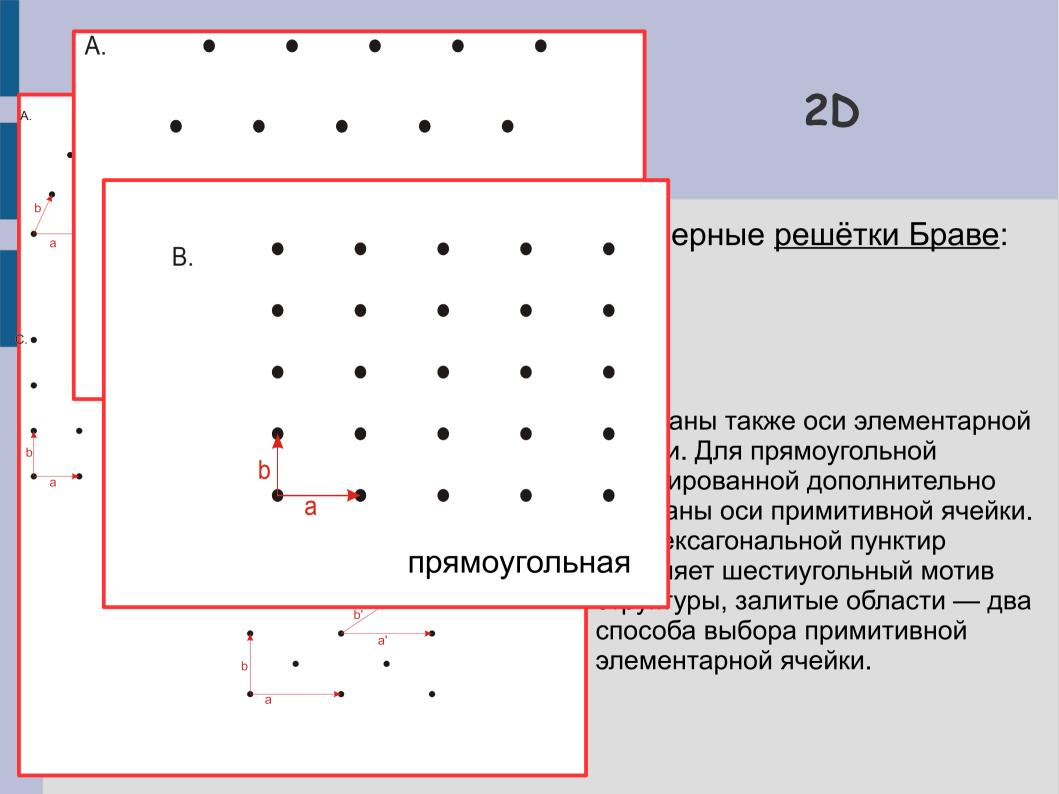
Показаны также оси элементарной ячейки. Для прямоугольной центрированной дополнительно показаны оси примитивной ячейки. Для гексагональной пунктир выделяет шестиугольный мотив структуры, залитые области — два способа выбора примитивной элементарной ячейки.

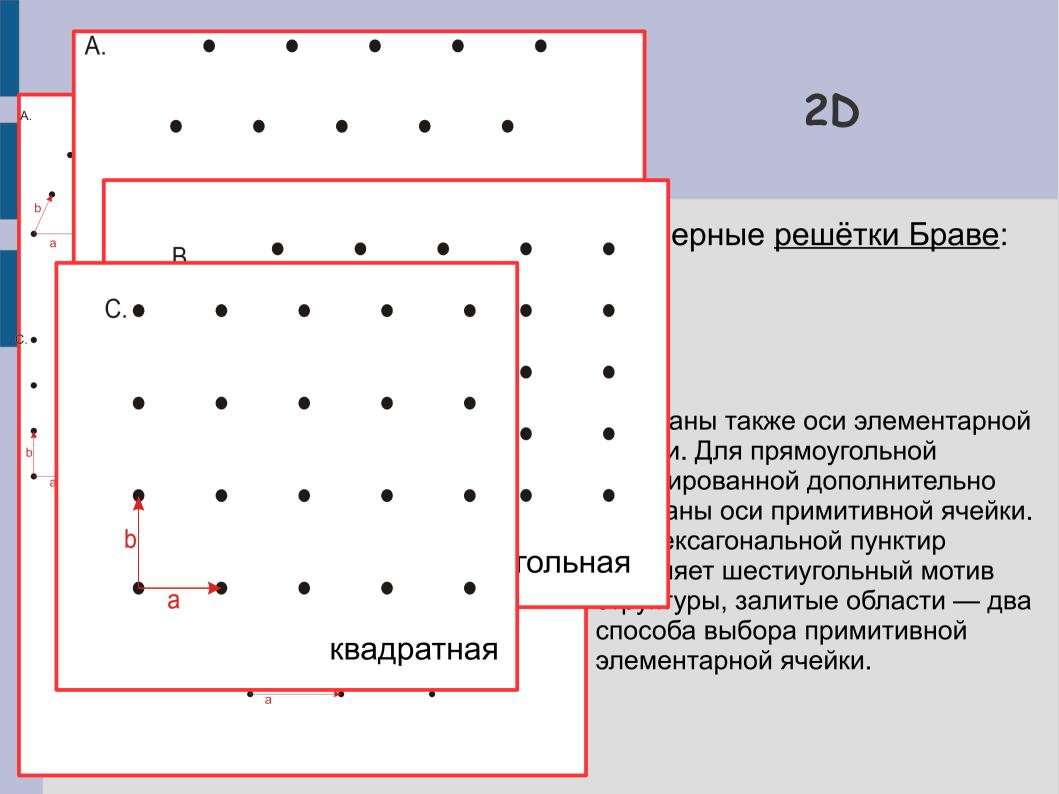


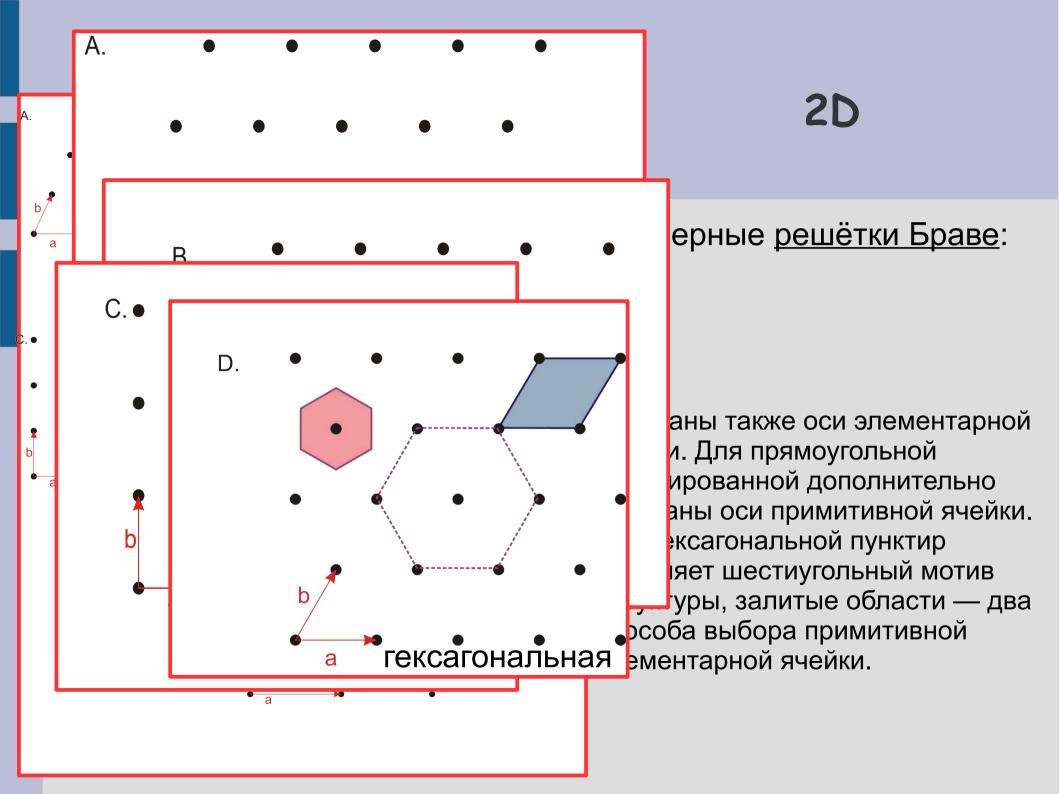
2D

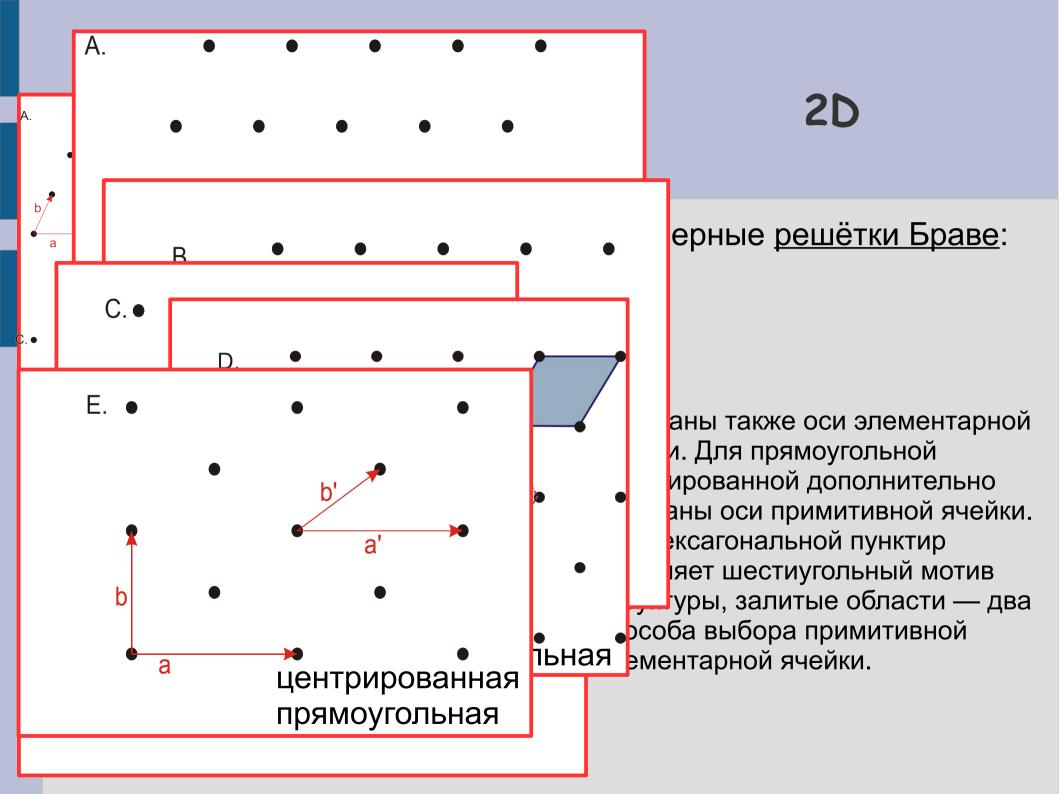
мерные <u>решётки Браве</u>:

Показаны также оси элементарной ячейки. Для прямоугольной центрированной дополнительно показаны оси примитивной ячейки. Для гексагональной пунктир выделяет шестиугольный мотив структуры, залитые области — два способа выбора примитивной элементарной ячейки.



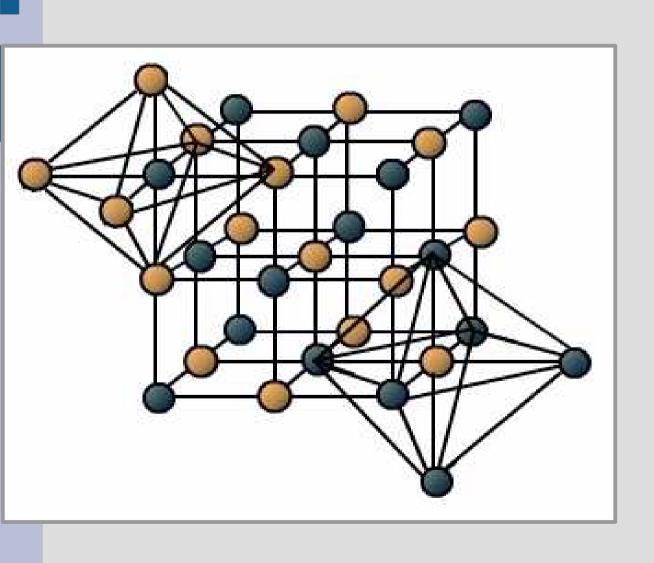


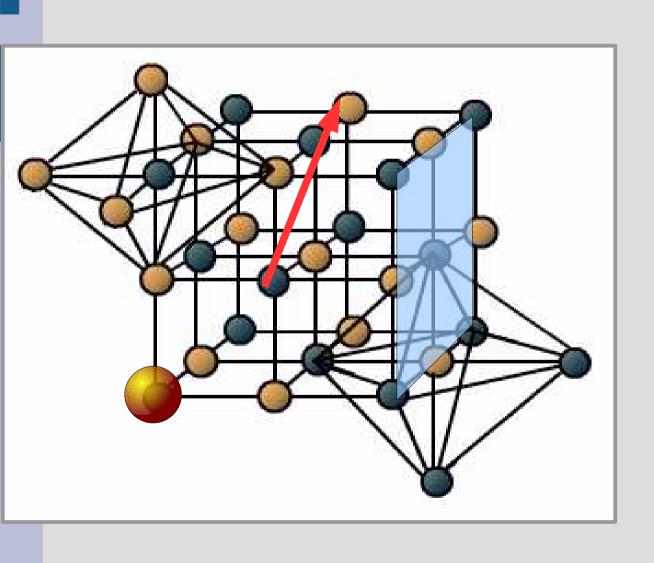




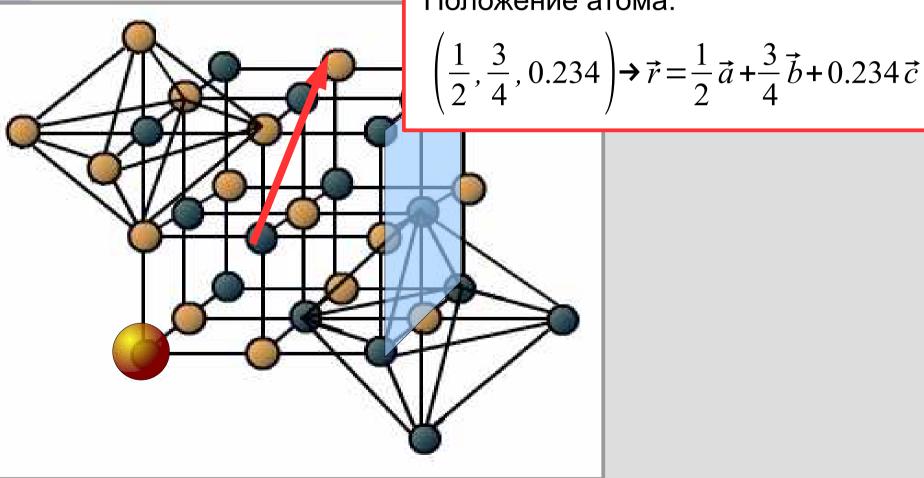
Решётки Браве в 3D.

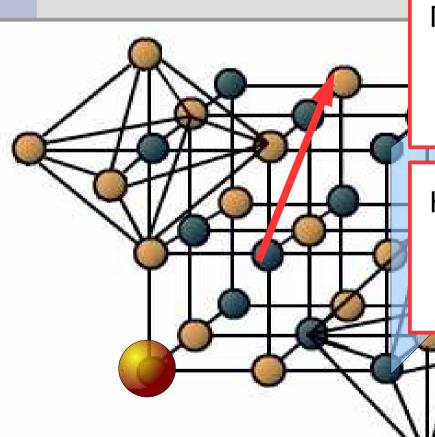
V	19904		7.00 59	Ser conservation	Триго-	1223 on the 2001	TORONIE OF ST
Тип Сингония решетки	Три- клинная	Моно- клинная	Ромби- ческая	Тетраго- нальная	нальная (ромбозд- рическая)		Куби- ческая
Примитивный	B						
Базоцентри- рованный							
Объемноцен- трированный							
Гранецентри- рованный							









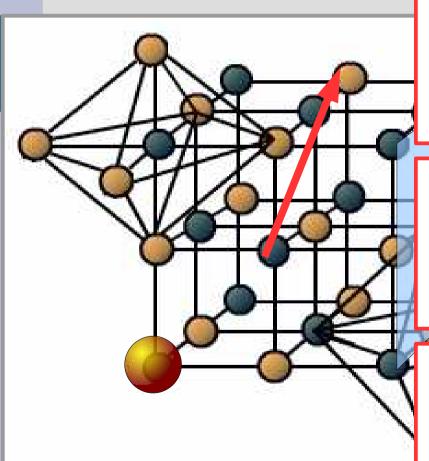


Положение атома:

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 0.234\right) \rightarrow \vec{r} = \frac{1}{2}\vec{a} + \frac{3}{4}\vec{b} + 0.234\vec{c}$$

Направление относительно кристалла:

$$[1,3,\bar{2}] \rightarrow \vec{r} = 1\vec{a} + 3\vec{b} - 2\vec{c}$$



Положение атома:

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 0.234\right) \rightarrow \vec{r} = \frac{1}{2}\vec{a} + \frac{3}{4}\vec{b} + 0.234\vec{c}$$

Направление относительно кристалла:

$$[1,3,\overline{2}] \rightarrow \vec{r} = 1\vec{a} + 3\vec{b} - 2\vec{c}$$

Плоскость в кристалле:

индексы Миллера (hlk)

Индексы Миллера.

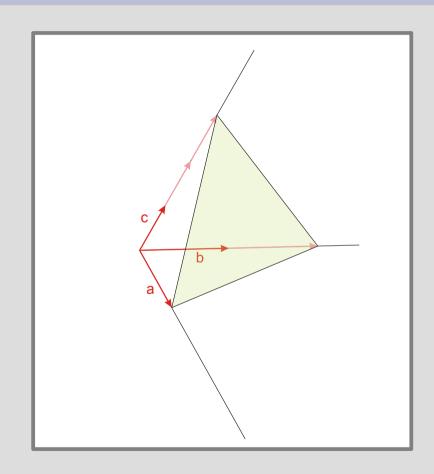
Алгоритм:

- •построить плоскость до пересечения с кристаллографическими осями координат
- •определить какие отрезки отсекаются от осей координат
- •взять обратные числа
- •привести их к наименьшему целому, кратному этим числам

Индексы Миллера.

Алгоритм:

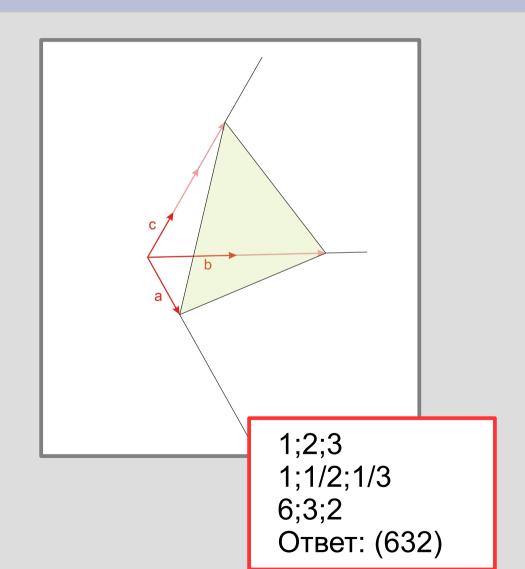
- •построить плоскость до пересечения с кристаллографическими осями координат
- •определить какие отрезки отсекаются от осей координат
- •взять обратные числа
- •привести их к наименьшему целому, кратному этим числам



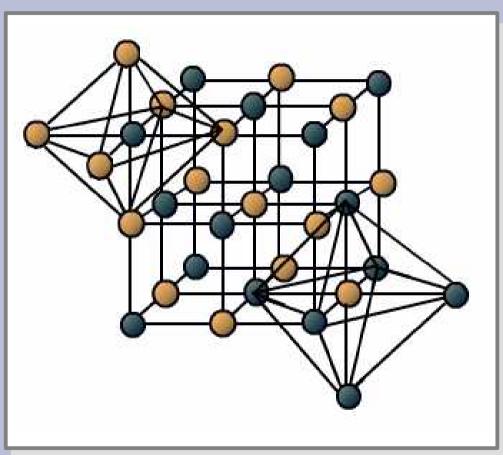
Индексы Миллера.

Алгоритм:

- •построить плоскость до пересечения с кристаллографическими осями координат
- •определить какие отрезки отсекаются от осей координат
- •взять обратные числа
- •привести их к наименьшему целому, кратному этим числам



Пример 1: Структура NaCl



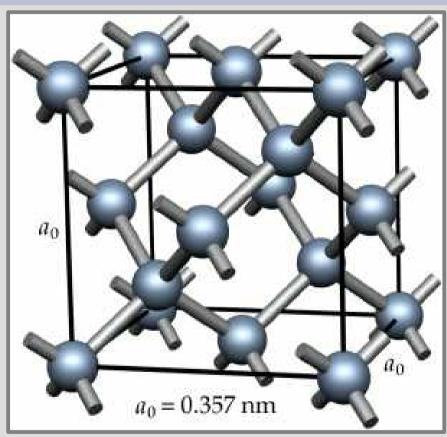
Решётка Браве этой структуры — кубическая гранецентрированная с периодом 5.64 Å.

Базис состоит из двух атомов:

- •атомы натрия (0;0;0)
- •атомы хлора (1/2;1/2;1/2)

Слева: структура NaCl (с сайта http://chemistry.tutorvista.com/inorganic-chemistry/crystal-structure.html), атомы хлора отмечены оранжевым, атомы натрия — синим.

Пример 2: Структура алмаза

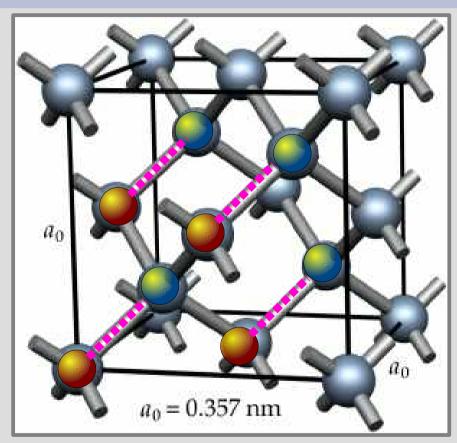


Структура алмаза (с сайта http://www.e6cvd.com/cvd/page.isp?pageid=361)

Решётка алмаза является кубической гранецентрированной.

Сторона элементарного куба равна 3.57Å. Базис состоит из двух атомов углерода в позициях 0;0;0 и 1/4;1/4;1/4

Пример 2: Структура алмаза



Структура алмаза (с сайта http://www.e6cvd.com/cvd/page.isp?pageid=361)

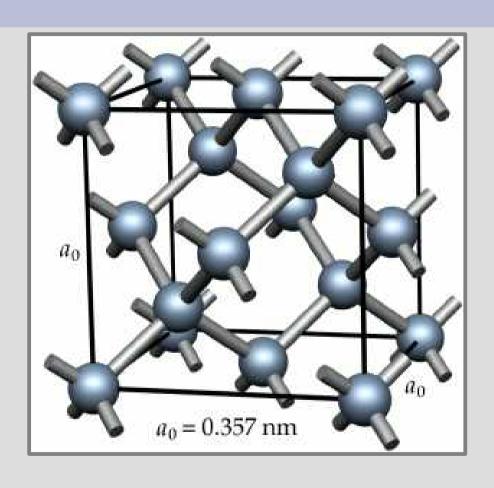
Решётка алмаза является кубической гранецентрированной.

Сторона элементарного куба равна 3.57Å. Базис состоит из двух атомов углерода в позициях (0;0;0) и (1/4;1/4;1/4)

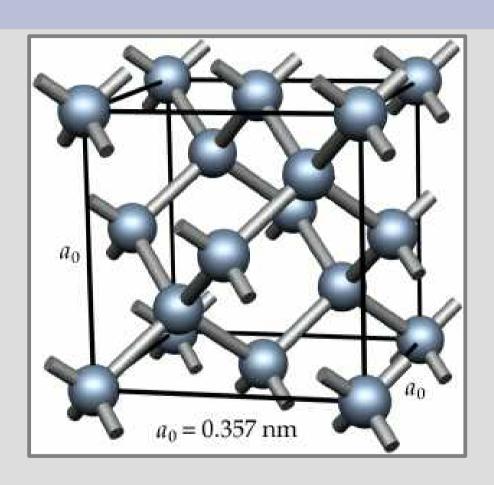
Базис выделен для наглядности. «Красные» атомы: в вершине и центрах граней.



Часть 2. Дифракция на кристалле.



Кристалл как дифракционная решетка



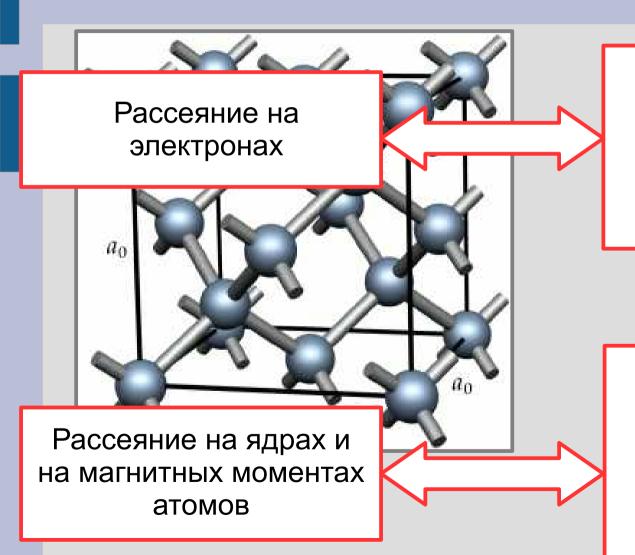
Рентгеновское излучение, 10 кэВ

$$\lambda = \frac{h c}{E} \simeq 0.12 \,\mathrm{HM}$$

Тепловые нейтроны, 25 мэВ

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 m E}} \approx 0.18 \,\mathrm{HM}$$

Кристалл как дифракционная решетка



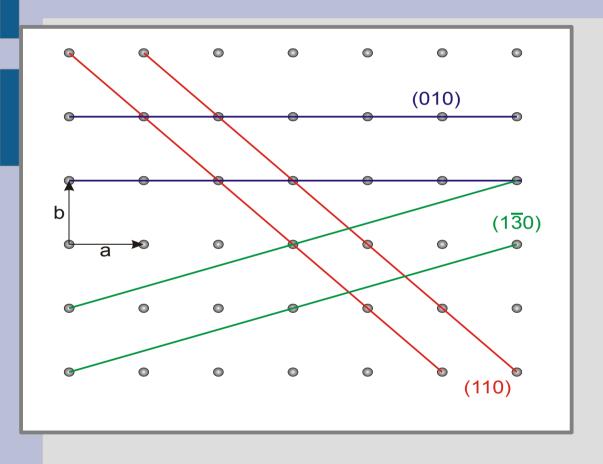
Рентгеновское излучение, 10 кэВ

$$\lambda = \frac{h c}{E} \simeq 0.12 \,\mathrm{HM}$$

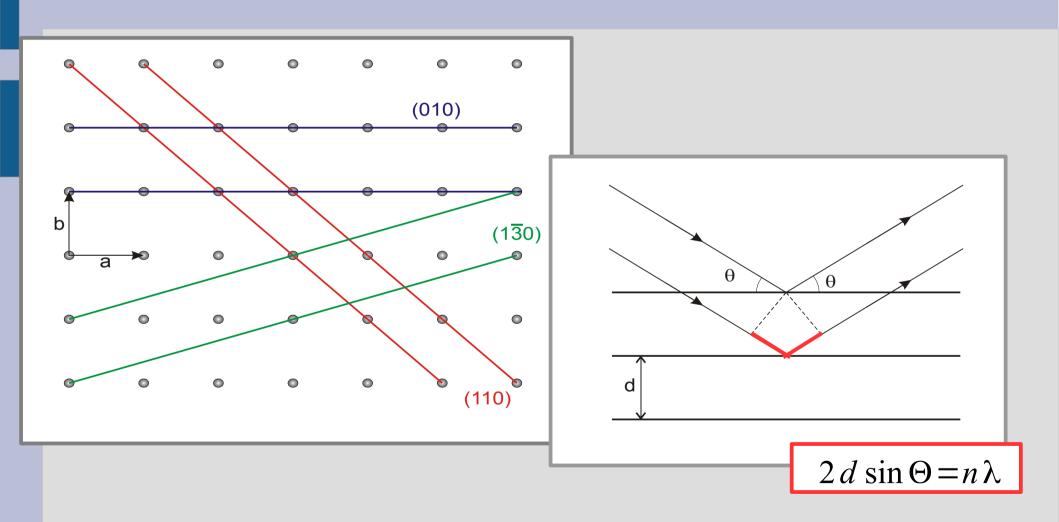
Тепловые нейтроны, 25 мэВ

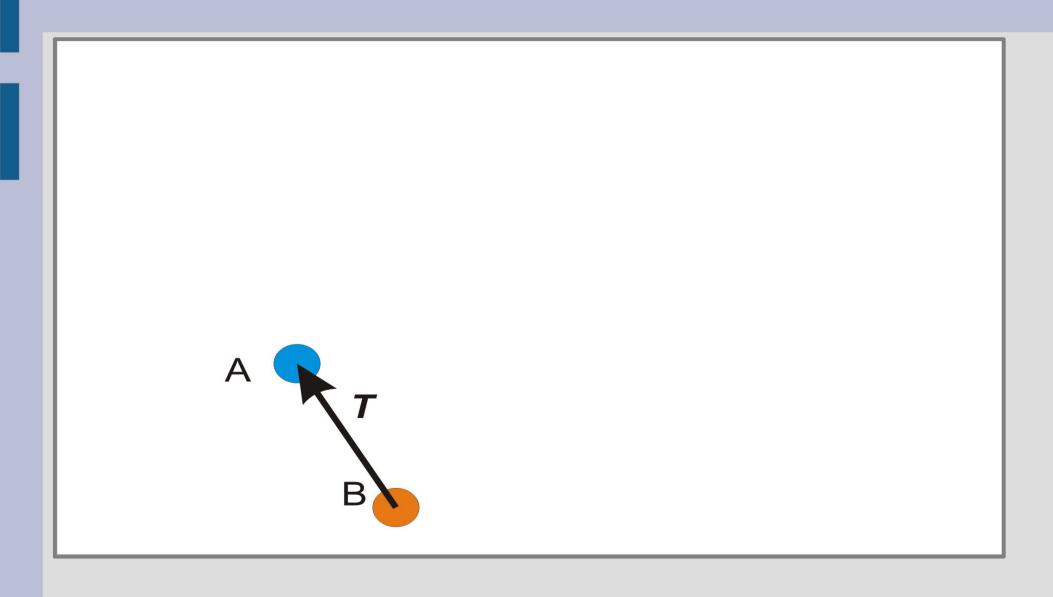
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 m E}} \approx 0.18 \,\mathrm{HM}$$

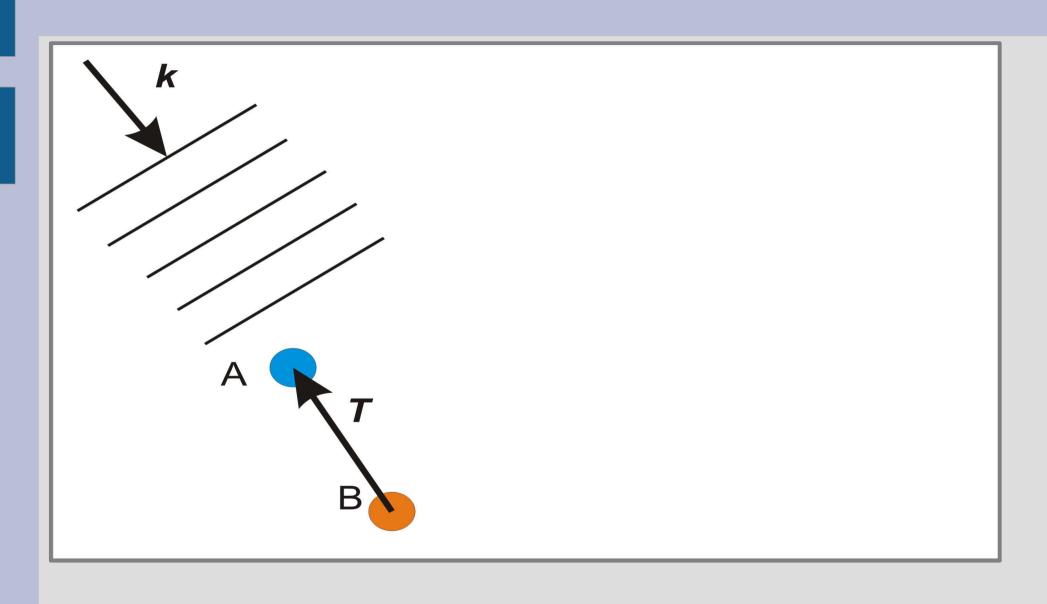
Условие Брэгга-Вульфа

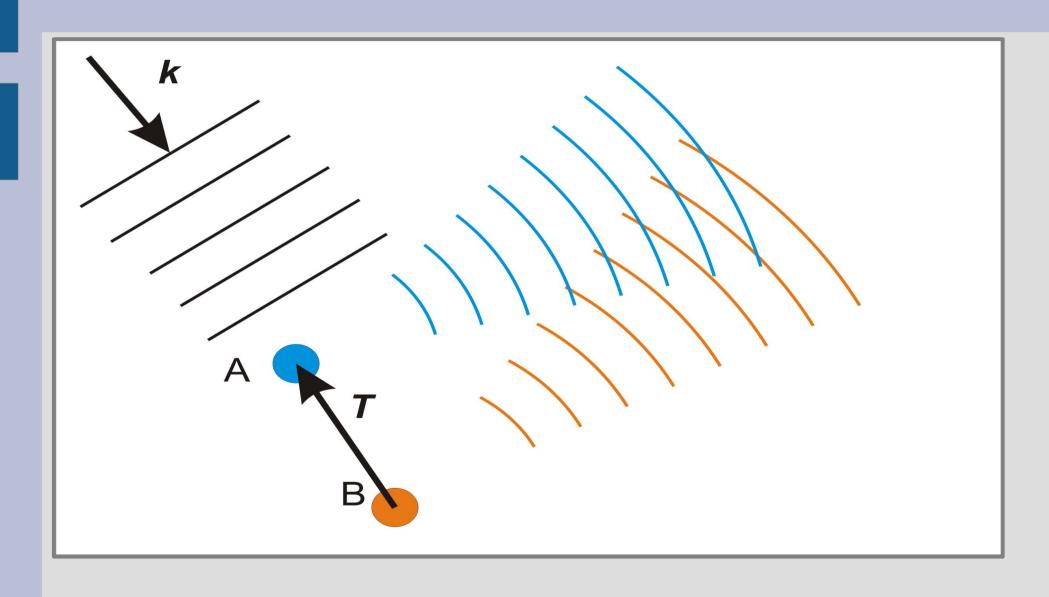


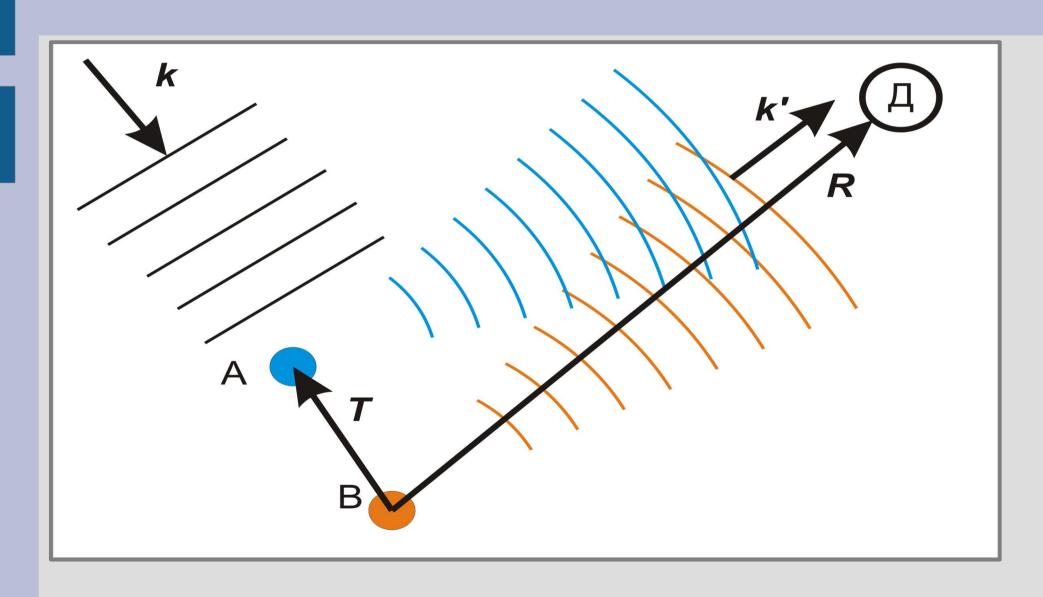
Условие Брэгга-Вульфа

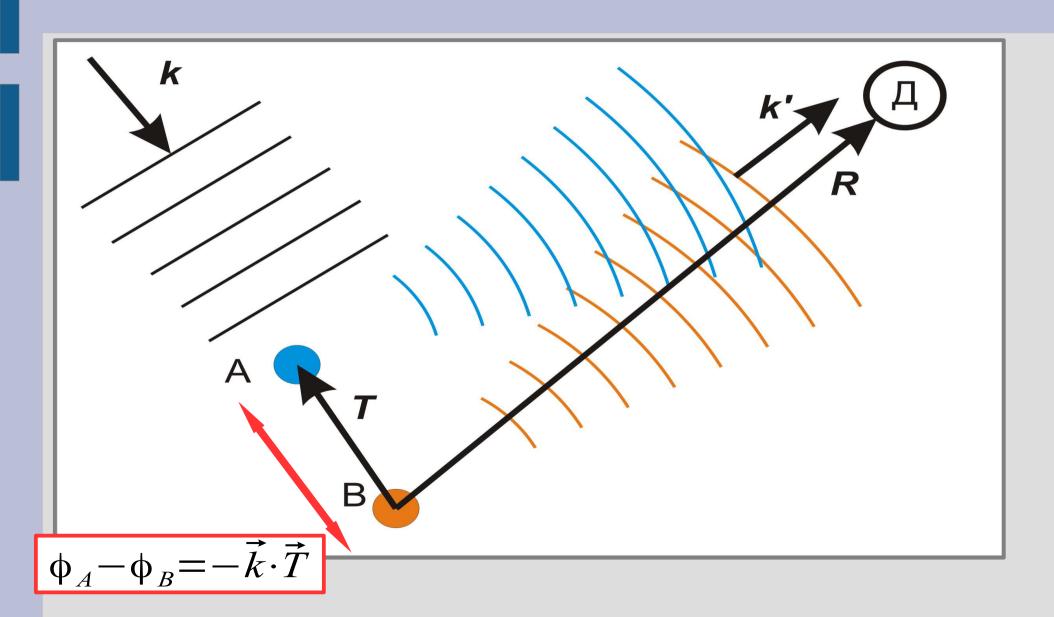


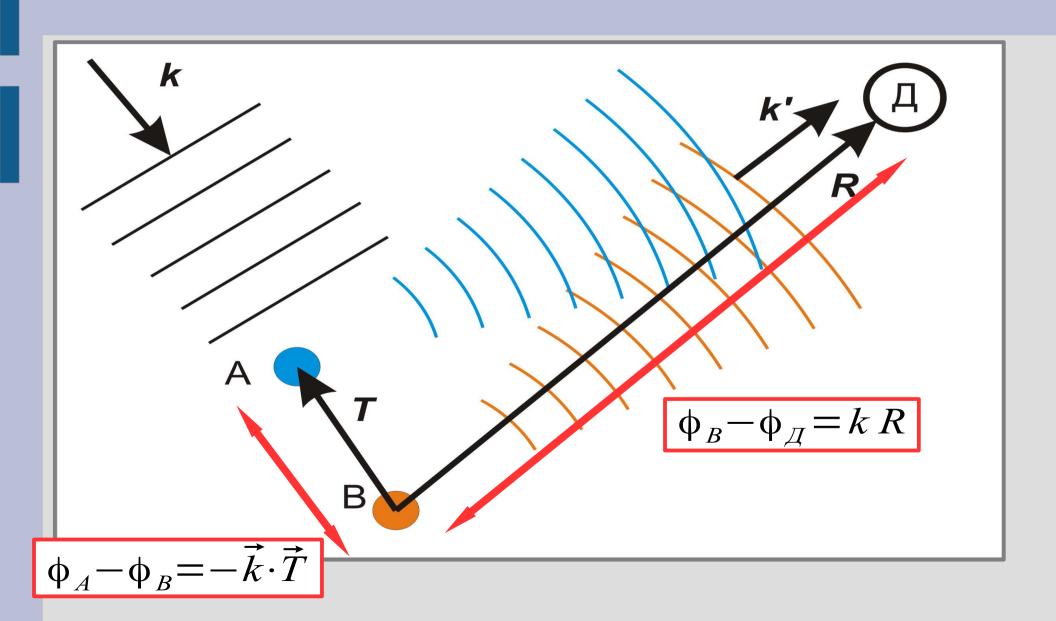


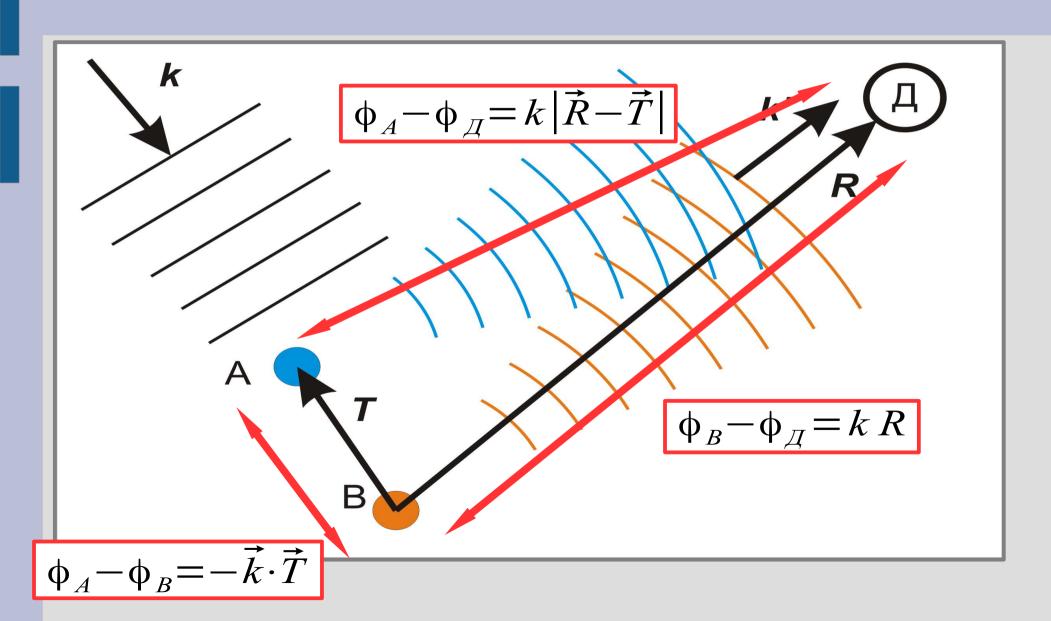


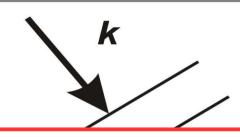










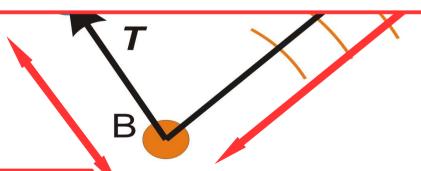


$$\phi_A - \phi_A = k |\vec{R} - \vec{T}|$$



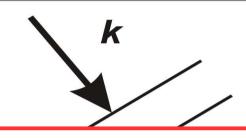
Суммарная разность фаз на детекторе

$$\Delta \phi = k |\vec{R} - \vec{T}| - (k R - \vec{k} \vec{T}) = k \sqrt{(\vec{R} - \vec{T})^2} - k R + \vec{k} \vec{T}$$



$$\phi_B - \phi_A = k R$$

$$\phi_A - \phi_B = -\vec{k} \cdot \vec{T}$$

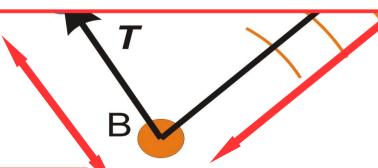


$$| \phi_A - \phi_{\mathcal{A}} = k | \vec{R} - \vec{T} |$$



Суммарная разность фаз на детекторе

$$\Delta \phi = k |\vec{R} - \vec{T}| - (kR - \vec{k}\vec{T}) = k\sqrt{(\vec{R} - \vec{T})^2} - kR + \vec{k}\vec{T} \approx \vec{k}\vec{T} - k\frac{(\vec{R}\vec{T})}{R} = (\vec{k} - \vec{k}')\vec{T}$$



$$\phi_B - \phi_A = k R$$

$$\phi_A - \phi_B = -\vec{k} \cdot \vec{T}$$

Обратная решётка

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

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

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

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

Обратная решётка

$$ec{a}^* = 2 \pi \frac{ [ec{b} imes ec{c}] }{ (ec{a} [ec{b} imes ec{c}]) }$$
 | Если $ec{k} - ec{k}' = p_1 ec{a}^* + p_2 ec{b}^* + p_3 ec{c}^* = ec{G}$ то условие дифракции выполнено!!!

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

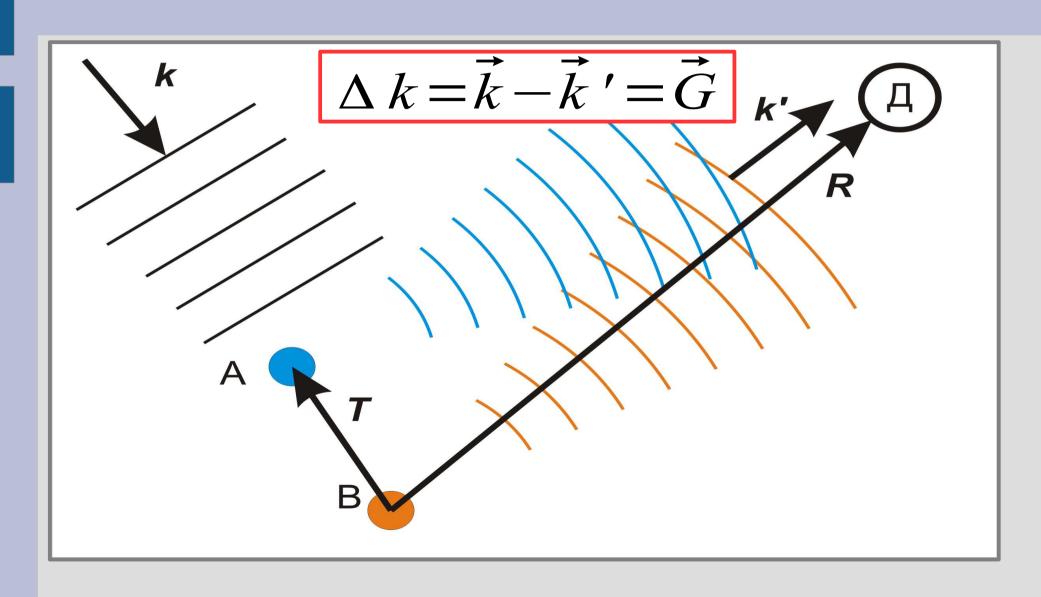
$$\vec{c}^* = 2 \pi \frac{\left[\vec{a} \times \vec{b}\right]}{\left(\vec{a} \left[\vec{b} \times \vec{c}\right]\right)}$$

Если
$$\vec{k} - \vec{k}' = p_1 \vec{a}^* + p_2 \vec{b}^* + p_3 \vec{c}^* = \vec{G}$$

$$(\vec{k} - \vec{k}')(n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}) =$$

$$= 2\pi (p_1 n_1 + p_2 n_2 + p_3 n_3)$$

Необходимое условие дифракции



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

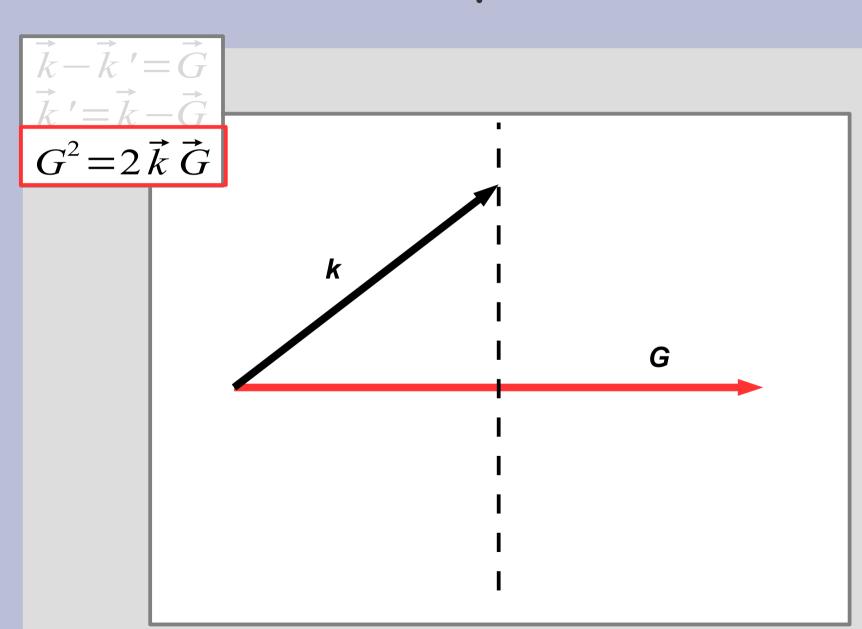
$$\vec{k}' = \vec{k} - \vec{G}$$

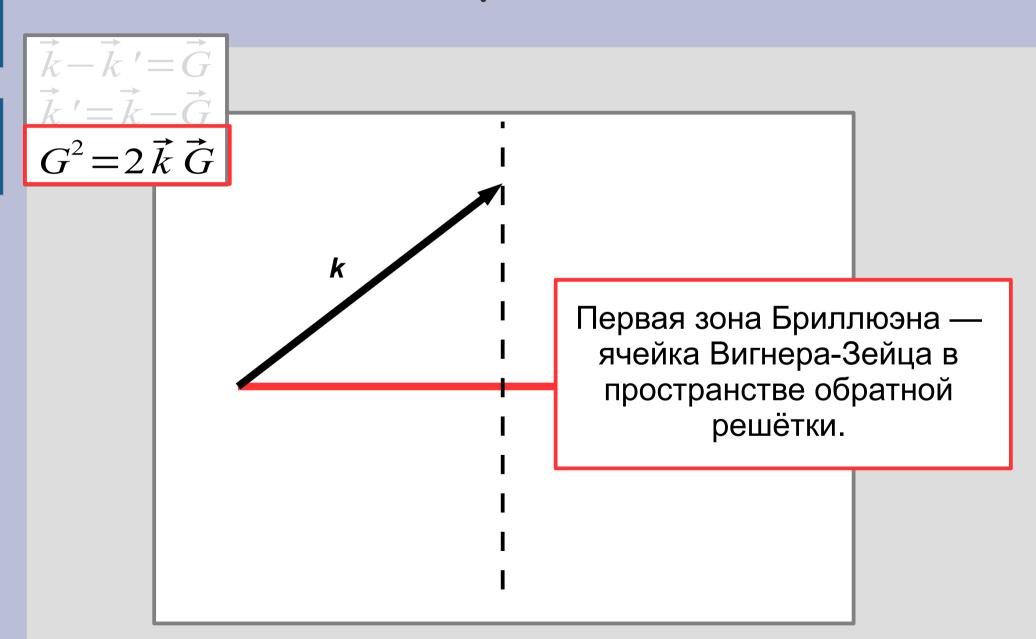
$$G^2 = 2\vec{k} \vec{G}$$

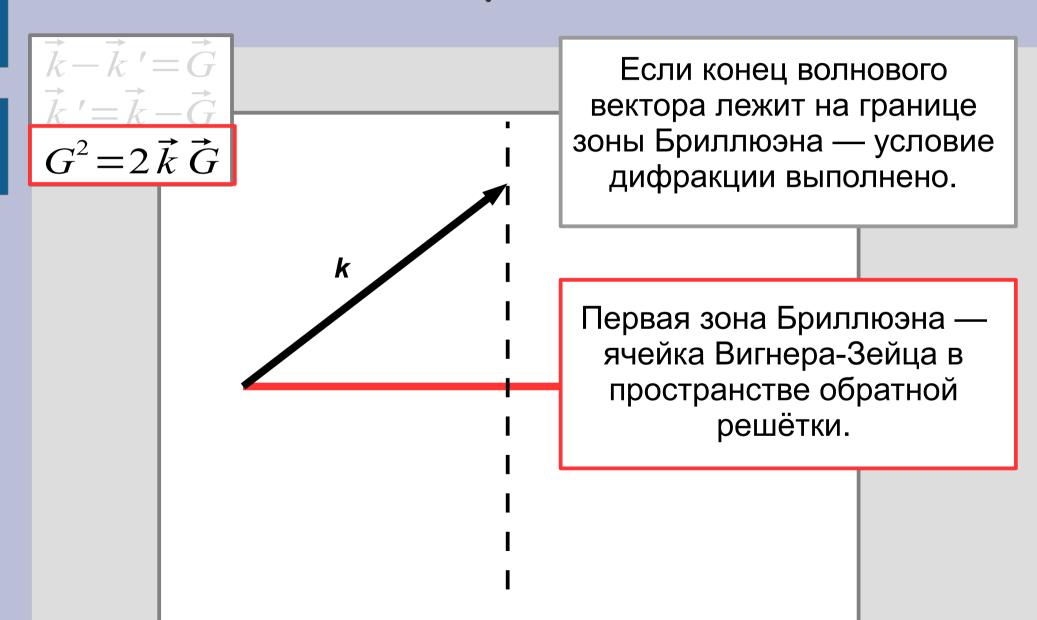
$$\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G}$$

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

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



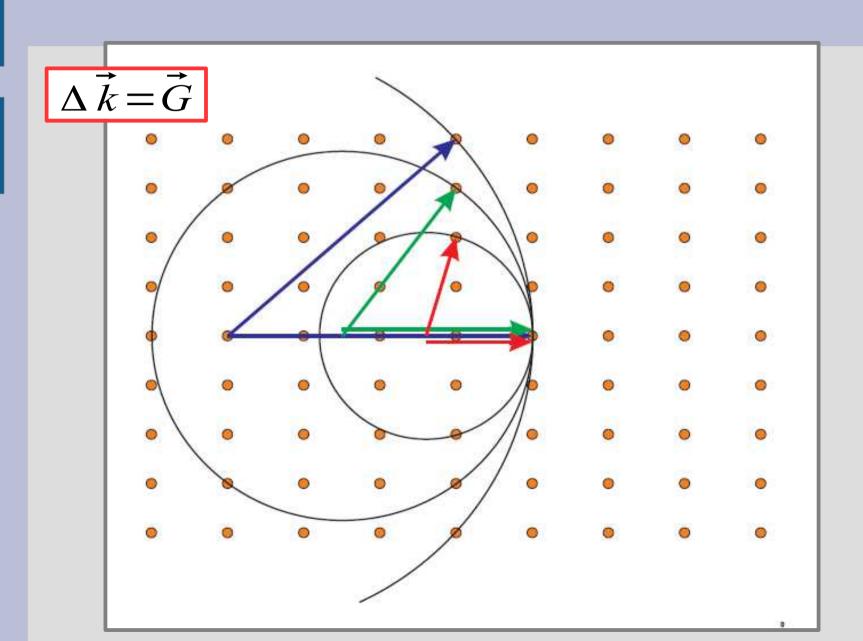




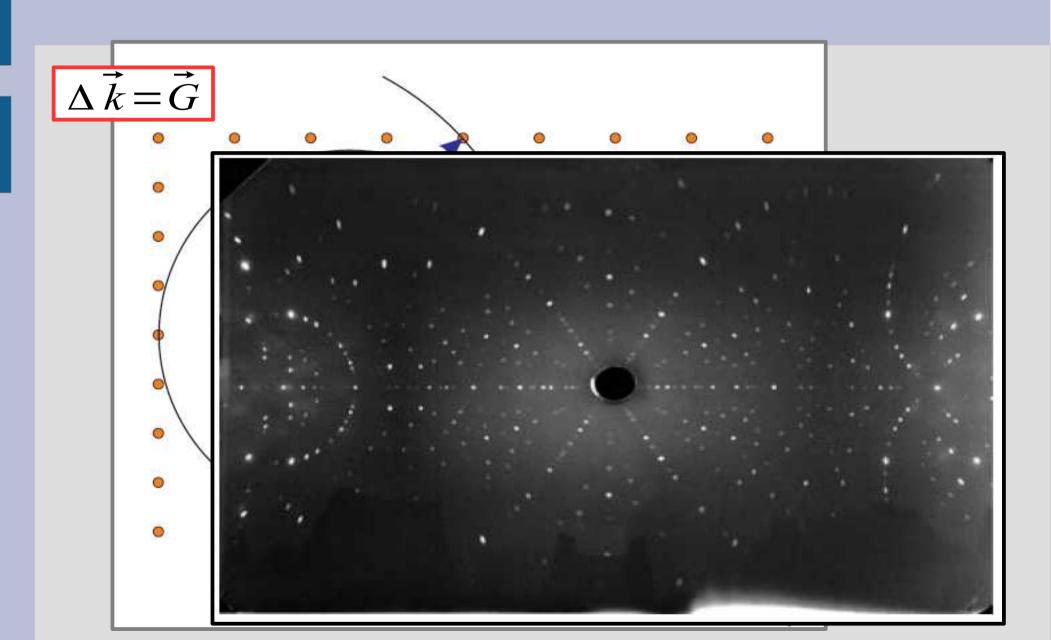
Дифракция Лауэ: монокристалл в «белом» свете

$$\Delta \vec{k} = \vec{G}$$

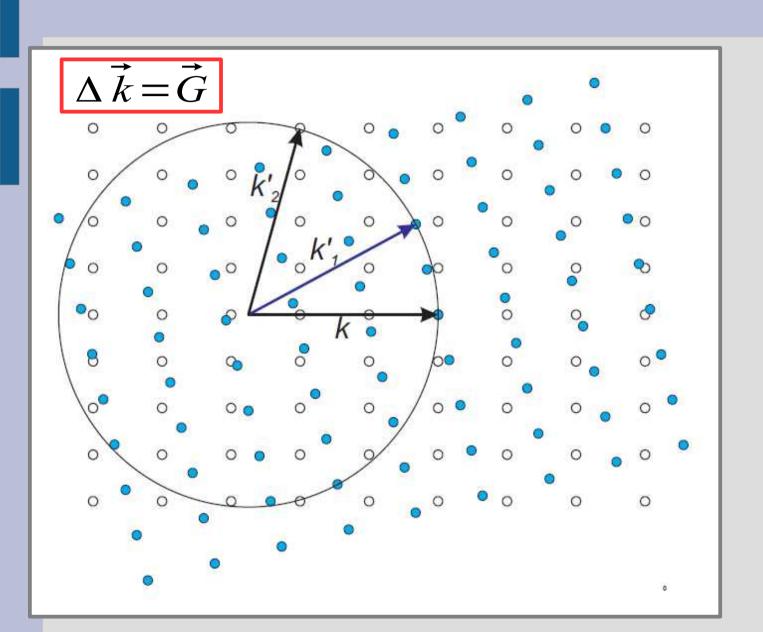
Дифракция Лауэ: монокристалл в «белом» свете

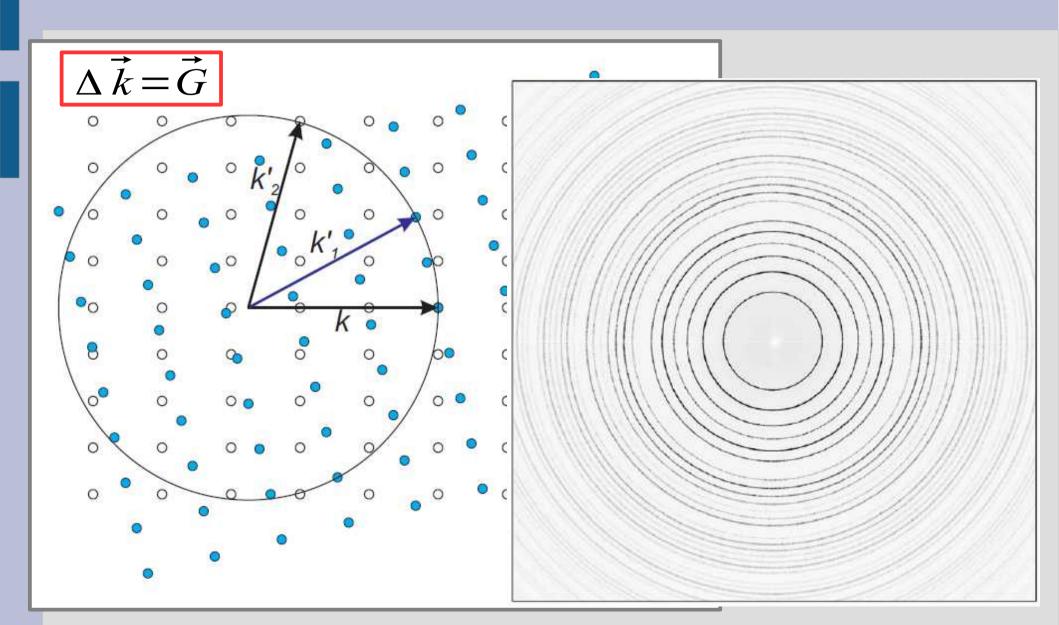


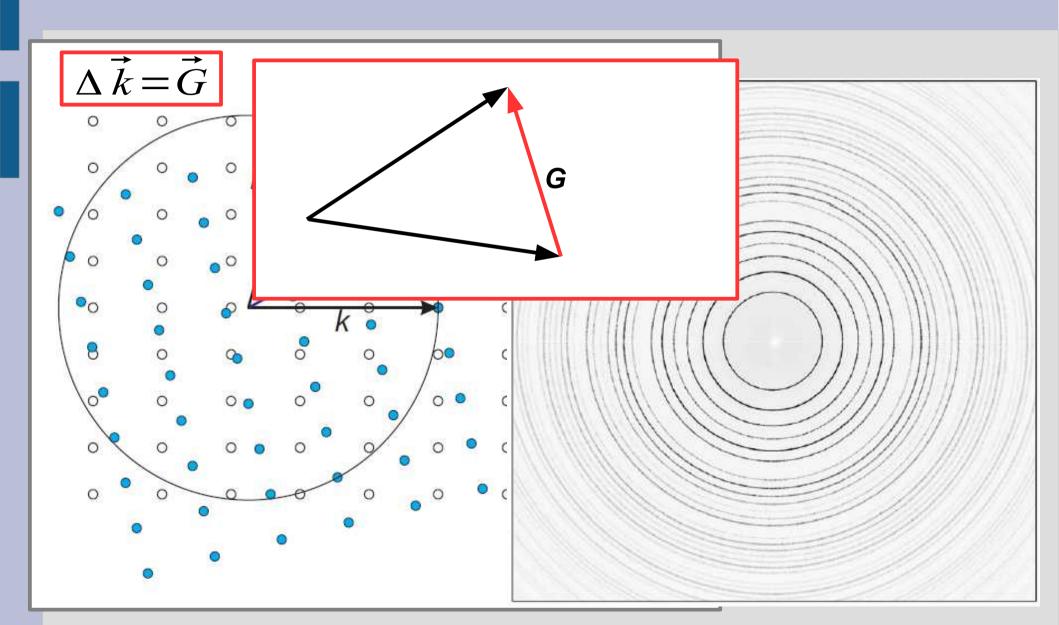
Дифракция Лауэ: монокристалл в «белом» свете



$$\Delta \vec{k} = \vec{G}$$

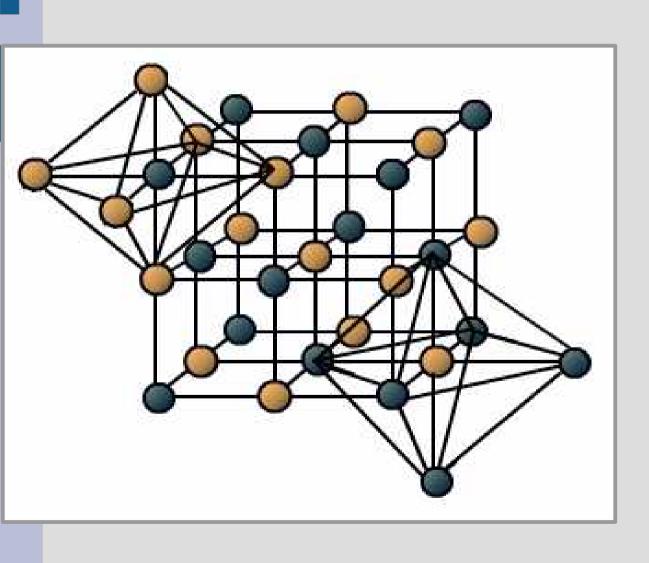




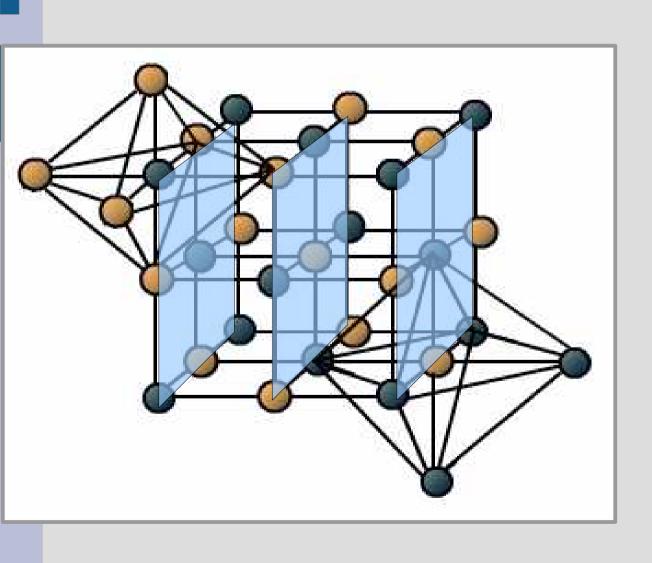




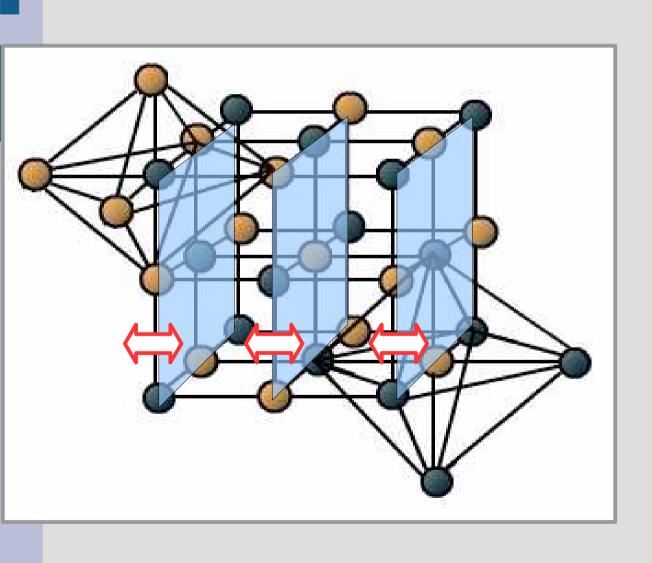
Часть 3. Колебания атомов в кристалле



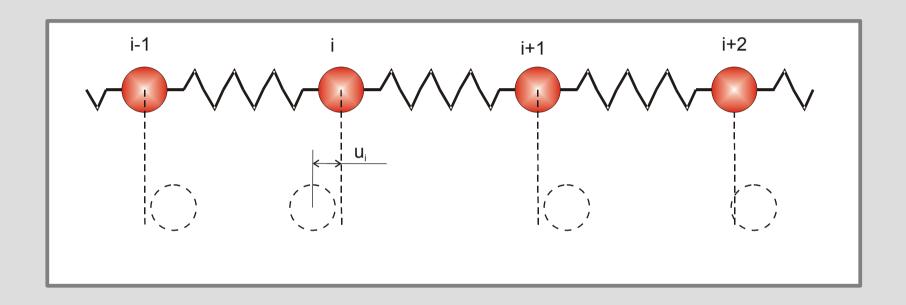
Часть 3. Колебания атомов в кристалле



Часть 3. Колебания атомов в кристалле



«Модель шариков и пружинок»



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

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

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

$$u_{j} = u_{0} e^{i(kx_{j} - \omega t)}$$
$$x_{j} = j \cdot a$$

решение в форме бегущей волны с произвольной амплитудой

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

$$u_{j} = u_{0} e^{i(kx_{j} - \omega t)}$$
$$x_{j} = j \cdot a$$

 $u_{j} = u_{0} e^{i(kx_{j} - \omega t)}$ решение в форме бегущей волны с произвольной амплитудой

$$-M \omega^{2} = C \left(e^{ika} + e^{-ika} - 2 \right) = -2C \left(1 - \cos(ka) \right) = -4C \sin^{2} \left(\frac{ka}{2} \right)$$

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

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

$$u_{j} = u_{0} e^{i(kx_{j} - \omega t)}$$
$$x_{j} = j \cdot a$$

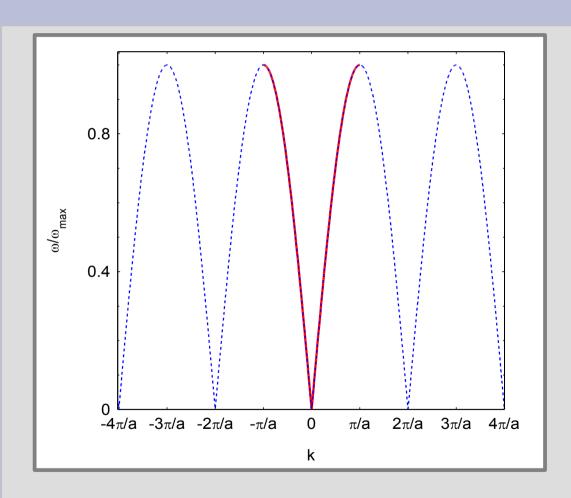
 $u_{j} = u_{0}e^{i(kx_{j}-\omega t)}$ решение в форме бегущей волны с произволить амплитудой

$$-M \omega^{2} = C \left(e^{ika} + e^{-ika} - 2 \right) = -2C \left(1 - \cos(ka) \right) = -4C \sin^{2} \left(\frac{ka}{2} \right)$$

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

<u>Только</u> при такой связи частоты и волнового вектора (при таком законе дисперсии) волна распространяется по кристаллу без затухания.

Звуковые волны, порядки величины...

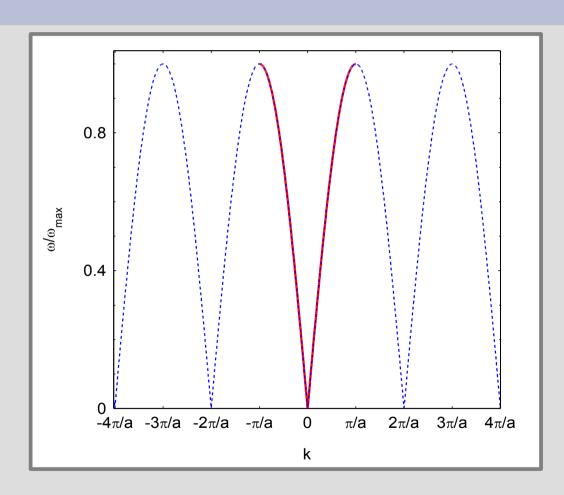


$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$k \to 0$$
 $\omega = a\sqrt{\frac{C}{M}}k = sk$

звуковые колебания
$$\omega = \frac{2s}{a}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$$

Звуковые волны, порядки величины...

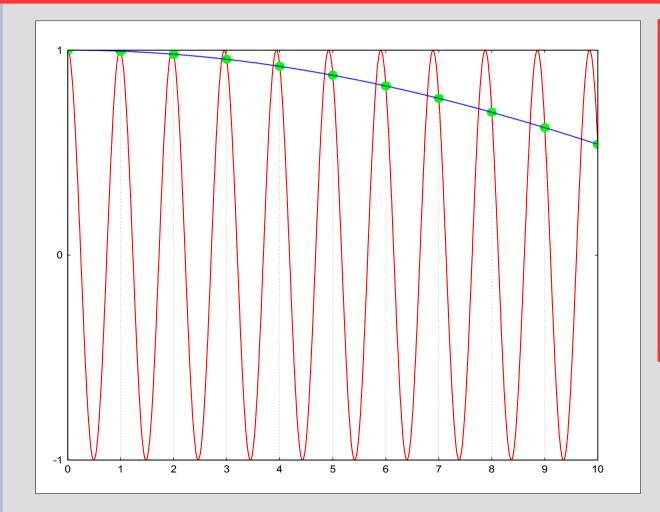


$$\omega = \frac{2s}{a} \left| \sin \left(\frac{ka}{2} \right) \right|$$

$$s=10^3 \, m/ce\kappa$$
 $a=2\cdot 10^{-10} \, m$
 $\omega_{max} \simeq 10^{13} \, 1/ce\kappa$
(ИК спектр, соответствует энергии ~7мэВ или температуре около 80К)

Роль первой зоны Бриллюэна.

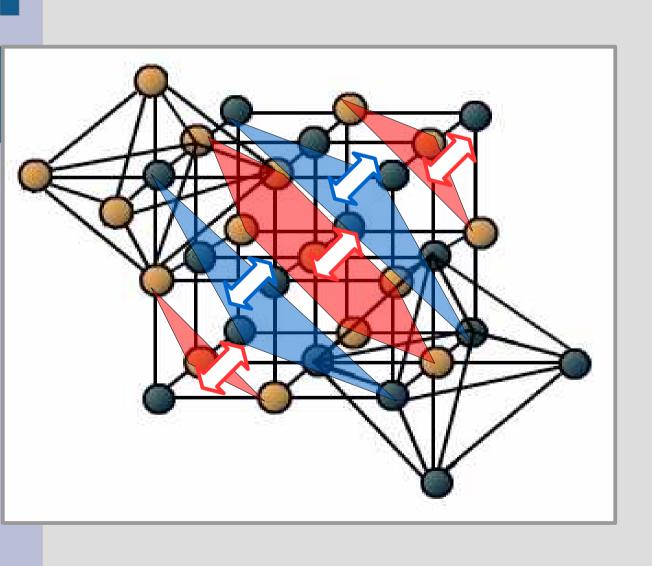
$$u(k+2\pi/a,ja)=u_0e^{i((k+2\pi/a)ja-\omega t)}=u_0e^{i(k+2\pi/a)ja-\omega t)}=u_0e^{i(k+2\pi/a)}e^{i2\pi j}=u(k,ja)$$



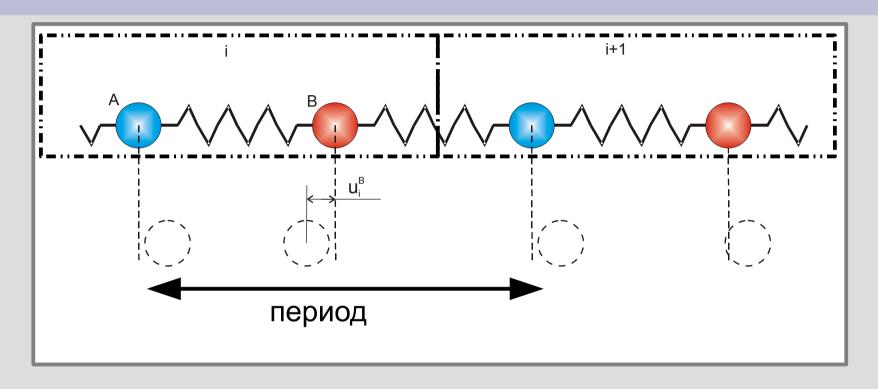
Волновые вектора всех физически различимых колебаний могут быть собраны в первой зоне Бриллюэна.

Сравнение "мгновенных фотографий" волн с различными волновыми векторами: k=0.1 (синяя линия) и k=0.1+2π (красная линия). Символами показаны смещения в точках дискретной решётки с единичным периодом.

Цепочка с атомами двух сортов



Цепочка с атомами двух сортов



$$M_{A} \frac{d^{2}u_{j}^{A}}{dt^{2}} = C\left(u_{j-1}^{B} + u_{j}^{B} - 2u_{j}^{A}\right)$$

$$M_{B} \frac{d^{2}u_{j}^{B}}{dt^{2}} = C\left(u_{j}^{A} + u_{j+1}^{A} - 2u_{j}^{B}\right)$$

$$M_{A} \frac{d^{2}u_{j}^{A}}{dt^{2}} = C\left(u_{j-1}^{B} + u_{j}^{B} - 2u_{j}^{A}\right)$$

$$M_{B} \frac{d^{2}u_{j}^{B}}{dt^{2}} = C\left(u_{j}^{A} + u_{j+1}^{A} - 2u_{j}^{B}\right)$$

$$u^{A} = u_{0}^{A} e^{i(kx - \omega t)}$$
$$u^{B} = u_{0}^{B} e^{i(kx - \omega t)}$$

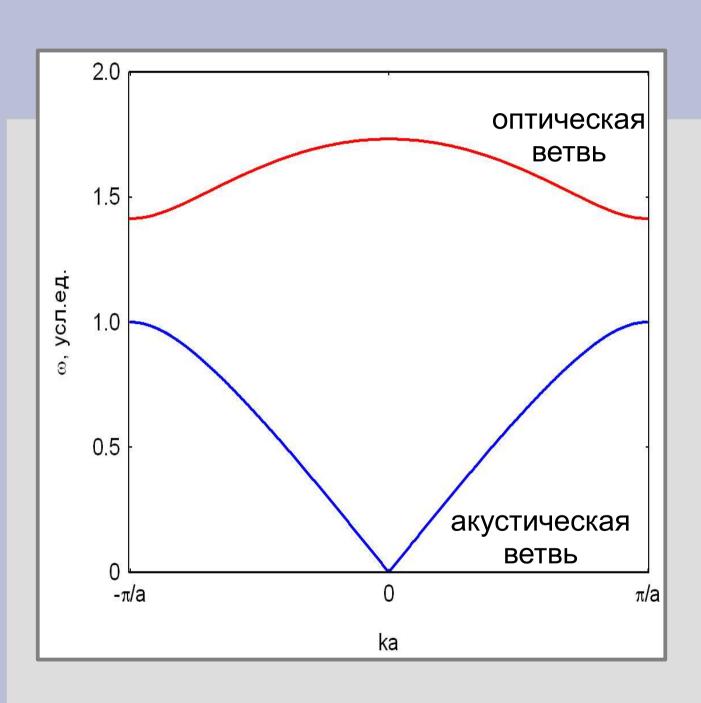
 $u^{A} = u_{0}^{A} e^{i(kx-\omega t)}$ решение в $u^{B} = u_{0}^{B} e^{i(kx-\omega t)}$ форме бегущей волны

$$-\frac{M_A}{C}\omega^2 u_0^A = u_0^B (e^{-ika} + 1) - 2u_0^A$$

$$-\frac{M_B}{C}\omega^2 u_0^B = u_0^A (1 + e^{ika}) - 2u_0^B$$

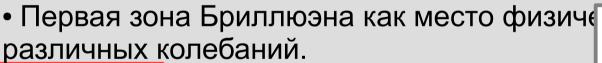
!!!здесь *а* период цепочки, расстояние между атомами одного сорта!!!

$$\begin{vmatrix} 2 - \frac{M_A \omega^2}{C} & -(1 + e^{-ika}) \\ -(1 + e^{ika}) & 2 - \frac{M_B \omega^2}{C} \end{vmatrix} = 0$$



Главное на лекции.

- Прямая и обратная решётка.
- Связь вектора обратной решётки с условием дифракции на кристалле.
- Построение первой зоны Бриллюэна.
- Модельные задачи о колебаниях в цепочках атомов.



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

