

Контрольная работа 2 по физике конденсированного состояния

Можаров Андрей

23 декабря 2025 г.

Задача 1

Условие

Пользуясь кинетическим уравнением Больцмана в приближении упругого рассеяния электронов на сферически симметричных дефектах, рассчитайте ток, вызываемый в металле зависящим от времени однородным электрическим полем $\vec{E}(t)$. Получите явное выражение для частотно-зависящей проводимости $\sigma(\omega)$ в случае периодически зависящего от времени поля $\vec{E}(t) = \text{Re}(\vec{E}(\omega) \cdot e^{-i\omega t})$.

Решение

Запишем кинетическое уравнение Больцмана в общем виде:

$$St\{f\} = \frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{v}, \text{grad}_{\vec{r}} f) + (\vec{F}, \text{grad}_{\vec{p}} f)$$

Для его решения, рассмотрим линеаризуем функцию распределения

$$f = f_0 + f_1$$

где $f_0 = f_0(\varepsilon(\vec{p}))$ — равновесная функция распределения. В приближении упругого рассеяния имеем $|\vec{p}_i| = |\vec{p}_f|$ (следствие закона сохранения энергии), откуда следует

$$\varepsilon(\vec{p}_i) = \varepsilon(\vec{p}_f) \quad f_0(\varepsilon(\vec{p}_i)) = f_0(\varepsilon(\vec{p}_f))$$

Тогда рассмотрев общий вид интеграла столкновений, получим:

$$St\{f\} = \int W(\vec{p}_i, \vec{p}_f)(f(\vec{p}_f) - f(\vec{p}_i)) \frac{d^3 \vec{p}_f}{(2\pi\hbar)^3} = \int W(\vec{p}_i, \vec{p}_f)(f_1(\vec{p}_f) - f_1(\vec{p}_i)) \frac{d^3 \vec{p}_f}{(2\pi\hbar)^3}$$

где $W(\vec{p}_i, \vec{p}_f)$ — вероятность перехода из состояния с импульсом \vec{p}_i в состояние с импульсом \vec{p}_f .

Ввиду сферической симметрии дефектов, а также упругости рассеяния, имеем

$$W(\vec{p}_i, \vec{p}_f) = W(\varepsilon, |\theta_f - \theta_i|)$$

где углы θ_i и θ_f — углы между осью Oz , выбранной по направлению поля, и соответствующим импульсом. Тогда также получим, что $f_1(\vec{p}_f) = f_1(\vec{p}_i)\cos(\theta_f - \theta_i)$, тогда получим интеграл столкновений в виде

$$St\{f\} = -f_1(\vec{p}_i) \int W(\varepsilon, |\theta_f - \theta_i|)(1 - \cos(\theta_f - \theta_i)) \frac{d^3\vec{p}_f}{(2\pi\hbar)^3} = -\frac{f_1}{\tau_{tr}}$$

где τ_{tr} — транспортное время релаксации (далее просто τ).

Используя полученные результаты, запишем кинетическое уравнение в случае данной задачи в однородном поле:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + e(\vec{E}(t), \vec{v}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -\frac{\partial f_1}{\partial \tau}$$

Тогда, переходя к комплексным амплитудам для поля и функции распределения, получим

$$f_1(\omega) = -\frac{e(\vec{E}(\omega), \vec{v})\tau}{1 - i\omega\tau} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

Тогда плотность тока $\vec{j}(\omega)$:

$$\vec{j}(\omega) = \int e\vec{v}f_1(\omega) \frac{2d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

Подставляя, переходя к сферическим координатам, интегрируя по углам, после чего переходя от интегрирования по модулю импульса к интегрированию по энергии и учитывая

$$-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \approx \delta(\varepsilon - \varepsilon_F) \quad g(\varepsilon_F) = \frac{3n}{mv_F^2}$$

получим из $\vec{j}(\omega) = \sigma(\omega)\vec{E}(\omega)$

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m(1 - i\omega\tau)} = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}$$

где $\sigma_0 = ne^2\tau/m$ — статическая удельная электропроводимость.

Ответ

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}$$

(Также, фактически, решение данной задачи может быть найдено в книге «Физика твёрдого тела» (Том 1) за авторством Ашкрофта и Мермина на стр. 31-32; Конкретно ответ данной задачи даётся выражением (1.29))

Задача 2

Условие

Считая, что источником электрического поля в металле является неравновесная электронная плотность и, используя локальный закон Ома в высокочастотном пределе ($\omega \gg 1/\tau_{tr}$),

$$\vec{j}(\omega, \vec{r}) = \sigma(\omega) \cdot \vec{E}(\omega, \vec{r})$$

где $\sigma(\omega)$ — частотно-зависящая проводимость, вычисленная в предыдущей задаче, найдите частоту колебаний неравновесной электронной плотности $n_e(t, \vec{r})$. Оцените величину этой частоты, используя типичные значения электронной плотности в металлах.

Решение

Для решения данной задачи используем следующую ниже систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0 & (\text{Уравнение непрерывности}) \\ \operatorname{div} \vec{E} = 4\pi\rho & (\text{Закон Гаусса/одно из уравнений Максвелла}) \\ \vec{j}(\omega) = \sigma(\omega)\vec{E}(\omega) & (\text{Закон Ома/материальное соотношение}) \end{cases}$$

Перейдя к Фурье-компонентам и подставив закон Ома в уравнение непрерывности, получим

$$-i\omega\rho + \sigma(\omega)\operatorname{div} \vec{E} = 0$$

Подставив закон Гаусса, получим

$$-i\omega\rho + 4\pi\sigma(\omega)\rho = 0 \quad \sigma(\omega) = \frac{i\omega}{4\pi}$$

Используем выражение для $\sigma(\omega)$, вычисленное в предыдущей задаче, учтя высокочастотный предел $\omega \gg 1/\tau$ ($\omega\tau \gg 1$):

$$\sigma(\omega) = \frac{ine^2}{m\omega}$$

Приравняв два выражения для $\sigma(\omega)$, получим:

$$\omega = \sqrt{\frac{4\pi ne^2}{m}}$$

Сделаем численную оценку для ω , взяв следующие значения:

Концентрация электронов в металлах $n \approx 10^{22} - 10^{23} \text{ см}^{-3}$

Элементарный заряд $e \approx 4,8 \cdot 10^{-10} \text{ ед. зар. СГСЭ}$

Масса электрона $m \approx 9,1 \cdot 10^{-28} \text{ г}$

Для данных значений имеем $\omega \approx 5,64 \cdot 10^{15} - 1,78 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$.

Ответ

$$\omega = \sqrt{\frac{4\pi ne^2}{m}} \approx 5,64 \cdot 10^{15} - 1,78 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$$

(Также, фактически, решение данной задачи может быть найдено в книге «Физика твёрдого тела» (Том 1) за авторством Ашкрофта и Мермина на стр. 32-33; конкретно, формула из ответа данной задачи получается извлечением квадратного корня из выражения (1.38))

Задача 3

Условие

Используя стационарное уравнение Больцмана в приближении времени релаксации (т.е. $St\{f\} = -(f - f_0(\varepsilon))/\tau$, где $f_0(\varepsilon)$ — равновесная функция распределения, τ — время релаксации, которое будем считать независимым от энергии ε) для электронов в однородном электрическом поле \vec{E} , найдите нелинейные по напряжённости поля поправки к закону Ома: $\delta j(E) = j(E) - \sigma \cdot E = \alpha_2 \cdot E^2 + \alpha_3 \cdot E^3 + \dots$, здесь j — плотность электрического тока, σ — удельная проводимость.

Решение

Запишем стационарное кинетическое уравнение Больцмана в общем виде

$$St\{f\} = \frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{v}, \text{grad}_{\vec{r}} f) + (\vec{F}, \text{grad}_{\vec{p}} f)$$

которое в приближении времени релаксации для электронов в электрическом поле \vec{E} примет вид

$$\frac{f - f_0(\varepsilon)}{\tau} = e (\vec{E}, \text{grad}_{\vec{p}} f)$$

или, выражая неравновесную функцию распределения f

$$f = f_0(\varepsilon) + e\tau (\vec{E}, \text{grad}_{\vec{p}} f)$$

Считая $E = |\vec{E}|$ малым параметром, будем данное уравнение методом последовательных приближений

$$f(\vec{p}) = f_0(\varepsilon(\vec{p})) + \sum_{n=1}^{\infty} f_n(\vec{p})$$

где $f_n(\vec{p}) \sim E^n$. Тогда, приравнявая равные порядки малости, получим (номер указывает порядок малости)

1. $f_1 = e\tau (\vec{E}, \text{grad}_{\vec{p}} f_0)$
2. $f_2 = e\tau (\vec{E}, \text{grad}_{\vec{p}} f_1) = (e\tau)^2 (\vec{E}, \nabla_{\vec{p}})^2 f_0$
3. $f_3 = e\tau (\vec{E}, \text{grad}_{\vec{p}} f_2) = (e\tau)^3 (\vec{E}, \nabla_{\vec{p}})^3 f_0$

что в общем случае принимает вид

$$f_n = e\tau (\vec{E}, \text{grad}_{\vec{p}}) f_{n-1} = (e\tau)^n (\vec{E}, \nabla_{\vec{p}})^n f_0$$

Рассмотрим плотность тока, которая в общем случае, определяется нижеследующим интегралом

$$\vec{j} = -e \int \vec{v}(\vec{p}) f(\vec{p}) \frac{2d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

тогда можно перейти от вектора плотности тока \vec{j} к рассмотрению его модуля $j = |\vec{j}|$ и определить поправки j_n по соответствующим порядкам малости (выразив их, соответственно, j_n через f_n)

$$j = \sum_n j_n, \quad \text{где } j_n = -\frac{e}{m}(e\tau)^n \int (\vec{E}, \nabla_{\vec{p}})^n f_0 \frac{2pd^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

Тогда $j_0 = 0$ (ток в отсутствие внешнего поля), а линейный член $j_1 = \sigma E$ (проводимость Друде).

Квадратичный по полю член $j_2 = 0$ (и все чётные поправки по полю, аналогично), т.к. подынтегральное выражение является нечётной функцией по импульсу, а интеграл берётся в симметричных пределах.

Вычислим j_3 «по честному». Для этого найдём f_3 (однако возьмём только члены, нечётные по импульсу, т.е. не зануляющиеся при интегрировании):

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{p}} &= \frac{\partial}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} = \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \\ f_1 &= e\tau \frac{(\vec{E}, \vec{p})}{m} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \\ f_2 &= (e\tau E)^2 \left(\frac{1}{m} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + \frac{p^2}{m^2} \frac{\partial^2 f_0}{\partial \varepsilon^2} \right) \\ f_3 &= (e\tau)^3 E^2 \left(\frac{3(\vec{E}, \vec{p})}{m^2} \frac{\partial^2 f_0}{\partial \varepsilon^2} + \frac{(\vec{E}, \vec{p})p^2}{m^3} \frac{\partial^3 f_0}{\partial \varepsilon^3} \right) \end{aligned}$$

Используя правила усреднения по углам и переходя к интегрированию по энергии, получим

$$j_3 = -\frac{e^4 \tau^3 E^3}{m^2} \int_0^\infty \left[2\varepsilon \frac{\partial^2 f_0}{\partial \varepsilon^2} + \frac{4}{5} \varepsilon^2 \frac{\partial^3 f_0}{\partial \varepsilon^3} \right] g(\varepsilon) d\varepsilon$$

Подавляя f_0 , получим

$$j_3 = -\frac{e^4 \tau^3 E^3}{m^2} \int_0^\infty \left[\frac{2\varepsilon}{(kT)^2} - \frac{4\varepsilon^2}{5(kT)^3} \right] f_0 g(\varepsilon) d\varepsilon$$

Вспомним, что

$$n = \int f_0 g(\varepsilon) d\varepsilon \quad \langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{n} \int \varepsilon f_0 g(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{3}{2} kT \quad \langle \varepsilon^2 \rangle = \frac{15}{4} (kT)^2$$

Подставляем средние значения:

$$\begin{aligned} j_3 &= -\frac{e^4 \tau^3 E^3 n}{m^2} \left[\frac{2\langle \varepsilon \rangle}{(kT)^2} - \frac{4\langle \varepsilon^2 \rangle}{5(kT)^3} \right] = n \left[\frac{2 \cdot \frac{3}{2} kT}{(kT)^2} - \frac{4 \cdot \frac{15}{4} (kT)^2}{5(kT)^3} \right] \\ j_3 &= -\frac{e^4 \tau^3 E^3 n}{m^2} \left[\frac{3}{kT} - \frac{3}{kT} \right] = 0 \end{aligned}$$

Ответ

При данных приближениях

$$\delta j(E) = 0$$

что будет неверно в общем случае при $\tau \neq const$ и при больших импульсах.

Задача 4

Условие

Используя кинетическое уравнение Больцмана для свободных электронов в металле, найдите дифференциальную термо-э.д.с. металла в области температур $kT \ll \varepsilon_F$ в случаях, когда транспортное время свободного пробега электронов равно:

1. $\tau_{tr}(\varepsilon) = \tau \equiv const$
2. $\tau_{tr}(\varepsilon) = 1/(v(\varepsilon)\sigma_{tr}n_i)$, где n_i — концентрация рассеивателей, $v(\varepsilon) = \sqrt{2\varepsilon/m}$ — скорость электрона с энергией, $\sigma_{tr} = \pi a^2$ — полное транспортное сечение рассеяния на твёрдой сфере радиуса.

Решение

Выражение для дифференциальной термо-ЭДС из лекций имеет следующий вид:

$$Q' = \frac{1}{eT} \frac{\langle \varepsilon \rangle - \mu \langle 1 \rangle}{\langle 1 \rangle}$$

где оператор усреднения $\langle F(\varepsilon) \rangle$ определяется следующим образом

$$\langle F(\varepsilon) \rangle = - \int_0^\infty K_0(\varepsilon) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} F(\varepsilon) \quad K_0(\varepsilon) = \frac{1}{3} g(\varepsilon) v^2(\varepsilon) \tau_{tr}(\varepsilon)$$

Применим разложение Зоммерфельда, приведённого в общем случае ниже, для вычисления интегралов $\langle 1 \rangle$ и $\langle \varepsilon \rangle$.

$$- \int_0^\infty F(\varepsilon) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \approx F(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \frac{d^2 F}{d\varepsilon^2} \Big|_{\varepsilon=\mu}$$

Тогда

$$\begin{aligned} \langle 1 \rangle &= - \int_0^\infty K_0(\varepsilon) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \approx K_0(\mu) + \frac{(\pi kT)^2}{6} \frac{d^2 K_0(\varepsilon)}{d\varepsilon^2} \Big|_{\varepsilon=\mu} \\ \langle \varepsilon \rangle &= - \int_0^\infty \varepsilon K_0(\varepsilon) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \approx \mu K_0(\mu) + \frac{(\pi kT)^2}{6} \frac{d^2}{d\varepsilon^2} (\varepsilon K_0(\varepsilon)) \Big|_{\varepsilon=\mu} \end{aligned}$$

И применим это к искомым случаям

1. $\tau_{tr} = \tau \equiv const$:

Вычисляем $K_0(\varepsilon)$:

$$K_0(\varepsilon) = g(\varepsilon) \frac{v^2(\varepsilon)}{3} \tau_{tr}(\varepsilon) = \frac{3}{2} \frac{n}{\varepsilon_F} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}} \cdot \frac{2\varepsilon}{3m} \cdot \tau = \frac{n\tau}{m} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F} \right)^{3/2} := \alpha \varepsilon^{3/2}$$

Вычисляем производные:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} K_0(\varepsilon) &= \frac{3}{2} \alpha \varepsilon^{1/2} & \frac{d^2}{d\varepsilon^2} K_0(\varepsilon) &= \frac{3}{4} \alpha \varepsilon^{-1/2} \\ \frac{d^2}{d\varepsilon^2} \varepsilon K_0(\varepsilon) &= \varepsilon \frac{d^2}{d\varepsilon^2} K_0(\varepsilon) + 2 \frac{d}{d\varepsilon} K_0(\varepsilon) = \frac{15}{4} \alpha \varepsilon^{1/2} \end{aligned}$$

Вычисляем усреднённые величины:

$$\langle 1 \rangle = \alpha \mu^{3/2} + \frac{(\pi k T)^2}{8} \alpha \mu^{-1/2} \quad \langle \varepsilon \rangle = \alpha \mu^{5/2} + \frac{5}{8} (\pi k T)^2 \alpha \mu^{1/2}$$

Вычисляем термо-ЭДС:

$$Q' = \frac{1}{eT} \frac{\frac{(\pi k T)^2}{2} \alpha \mu^{1/2}}{\alpha \mu^{3/2} + \frac{(\pi k T)^2}{8} \alpha \mu^{-1/2}} = \frac{1}{eT} \frac{\mu}{\frac{2\mu^2}{(\pi k T)^2} + \frac{1}{4}} \approx \frac{\pi^2}{2} \frac{k^2 T}{e \varepsilon_F}$$

2. $\tau_{tr}(\varepsilon) = 1/(v(\varepsilon)\sigma_{tr}n_i)$:

Вычисляем $K_0(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} K_0(\varepsilon) &= g(\varepsilon) \frac{v^2(\varepsilon)}{3} \tau_{tr}(\varepsilon) = \frac{3}{2} \frac{n}{\varepsilon_F} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F}} \cdot \frac{2\varepsilon}{3m} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}} \pi a^2 n_i} = \\ &= \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{n\varepsilon}{n_i \varepsilon_F^{3/2} \sqrt{m} \pi a^2} := \alpha \varepsilon \end{aligned}$$

Вычисляем производные:

$$\frac{d}{d\varepsilon} K_0(\varepsilon) = \alpha \quad \frac{d^2}{d\varepsilon^2} K_0(\varepsilon) = 0 \quad \frac{d^2}{d\varepsilon^2} \varepsilon K_0(\varepsilon) = 2\alpha$$

Вычисляем усреднённые величины:

$$\langle 1 \rangle = \alpha \mu \quad \langle \varepsilon \rangle = \alpha \mu^2 + \frac{(\pi k T)^2}{3} \alpha$$

Вычисляем термо-ЭДС:

$$Q' = \frac{1}{eT} \frac{\frac{(\pi k T)^2}{3} \alpha}{\alpha \mu} = \frac{(\pi k T)^2}{3eT\mu} \approx \frac{\pi^2}{3} \frac{k^2 T}{e \varepsilon_F}$$

Ответ

$$Q'_1 \approx \frac{\pi^2}{2} \frac{k^2 T}{e \varepsilon_F} \quad Q'_2 \approx \frac{\pi^2}{3} \frac{k^2 T}{e \varepsilon_F}$$

Задача 5

Условие

Найти коэффициенты компактности (относительный объём идентичных соприкасающихся шаров с центрами в узлах решётки) для г.ц.к. и о.ц.к. решёток Браве и структуры типа алмаза.

Решение

Расчётная формула коэффициента компактности, который показывает какую долю объёма ячейки занимают атомы, имеет следующий вид

$$f = \frac{N \cdot V_{\text{шара}}}{V_{\text{ячейки}}}$$

где f — коэффициент компактности, N — количество атомов в одной ячейке, $V_{\text{шара}}$ — объём одного шара, $V_{\text{ячейки}}$ — объём одной ячейки.

Гранецентрированная кубическая решётка (приведена на рис. 1)

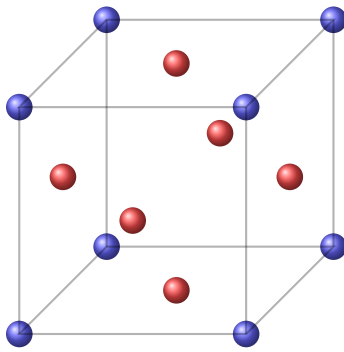


Рис. 1: Элементарная ячейка г. ц. к. решётки

Здесь количество атомов в одной ячейке будет равным

$$N = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$$

Связь радиуса шара R с периодом решётки a : можно выразить через диагональ грани $a\sqrt{2} = 4R$. Тогда

$$f = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3}{a^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} \approx 0.74$$

Объёмноцентрированная кубическая решётка (приведена на рис. 2)

Здесь количество атомов в одной ячейке будет равным

$$N = 8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$$

Связь радиуса шара R с периодом решётки a : можно выразить через диагональ куба $a\sqrt{3} = 4R$. Тогда

$$f = \frac{2 \cdot \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a\sqrt{3}}{4}\right)^3}{a^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} \approx 0.68$$

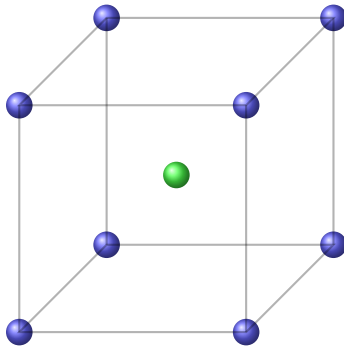


Рис. 2: Элементарная ячейка о. ц. к. решётки

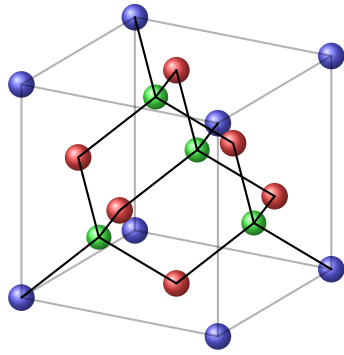


Рис. 3: Элементарная ячейка структуры типа алмаза

Структура типа алмаза (приведена на рис. 3)

Здесь количество атомов в одной ячейке будет равным

$$N = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} + 4 \cdot 1 = 8$$

Рассмотрим двух «ближайших соседей» в точках $(0, 0, 0)$ и $(a/4, a/4, a/4)$. Расстояние между ними равно $2R$, но с другой стороны оно же равно $\sqrt{3 \cdot (a/4)^2} = a\sqrt{3}/4$. Тогда

$$f = \frac{8 \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a\sqrt{3}}{8} \right)^3}{a^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{16} \approx 0.34$$

Ответ

$$f_{\text{г.ц.к.}} \approx 0.74 \quad f_{\text{о.ц.к.}} \approx 0.68 \quad f_{\text{стр. алмаза}} \approx 0.34$$

Задача 6

Условие

Докажите, что идеальное отношение c/a для гексагональной плотноупакованной структуры равно $\sqrt{8/3} \approx 1,633$. Найдите коэффициент компактности для этой структуры.

Решение

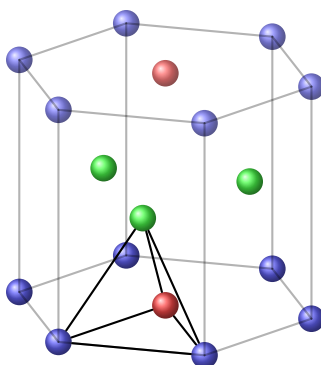


Рис. 4: Элементарная ячейка гексагональной плотноупакованной структуры

Атомы в базисной плоскости касаются друг друга, поэтому сторона шестиугольника $a = 2R$.

Центральный слой атомов располагается в «выемках» между атомами нижнего слоя. Рассмотрим тетраэдр (выделенный контур на рис. 4), образованный тремя касающимися атомами в нижнем слое и одним атомом из среднего слоя, который лежит в углублении между ними.

1. Все ребра этого тетраэдра равны a (так как все атомы касаются друг друга).
2. Высота этого тетраэдра составляет ровно половину высоты всей ячейки, то есть $c/2$.
3. Расстояние от вершины до центра основания (медиана треугольника в основании): $r_d = \frac{a}{\sqrt{3}}$.

Тогда по теореме Пифагора для высоты тетраэдра ($h = c/2$):

$$(c/2)^2 + (a/\sqrt{3})^2 = a^2$$

$$\frac{c^2}{a^2} = \frac{8}{3}$$

Что и требовалось доказать.

Найдём коэффициент компактности f . Число атомов в ячейке N состоит из суммы:

- 12 атомов в вершинах (каждый принадлежит 6 ячейкам): $12 \cdot 1/6 = 2$.
- 2 атома в центрах оснований (каждый принадлежит 2 ячейкам): $2 \cdot 1/2 = 1$.
- 3 атома внутри ячейки: $3 \cdot 1 = 3$.

Итого $N = 6$. Объём элементарной ячейки равен объёму прямоугольной призмы с правильным шестиугольником со стороной a в основании. Площадь правильного шестиугольника будет равна шести площадям равносторонних треугольников со стороной a

$$S_{\text{осн.}} = 6 \cdot \frac{a^2 \sqrt{3}}{4} = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2$$

Объём прямоугольной призмы будет равен произведению площади основания на высоту

$$V_{\text{ячейки}} = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 \cdot a \sqrt{\frac{8}{3}} = 3\sqrt{2} a^3$$

Тогда

$$f = \frac{8 \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{3\sqrt{2} a^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.74$$

Ответ

$$f = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.74$$

Задача 7

Условие

1. Найдите плотность точек решётки в атомной плоскости (число узлов на единицу площади), если расстояние между соседними плоскостями в семействе, которому принадлежит данная плоскость, равно d , а объёмная плотность точек данной решётки Бравэ равна n ;
2. Найдите и изобразите семейство плоскостей в г.ц.к. и о.ц.к. решётках Бравэ, для которых плотность точек максимальна (плоскости скола).

Решение

1. Рассмотрим семейство параллельных кристаллографических плоскостей. Пусть расстояние между соседними плоскостями равно d . По определению семейства плоскостей, каждая точка решётки Бравэ принадлежит какой-то одной плоскости из этого семейства.

Выделим на одной из плоскостей участок площадью S . Если мы продлим этот участок перпендикулярно плоскостям, мы получим объём

$$V = S \cdot d$$

ограниченный цилиндрической поверхностью.

В объёме V , ограниченном расстоянием d , содержится ровно столько точек, сколько их приходится на площадь S одной плоскости. Число точек в этом объёме

$$N = n \cdot V = n \cdot S \cdot d$$

Поверхностная плотность σ — это количество точек на единицу площади:

$$\sigma = \frac{N}{S}$$

Тогда

$$\sigma = n \cdot d$$

Т.е. чем больше межплоскостное расстояние, тем выше плотность упаковки атомов в самой плоскости.

2. Согласно формуле $\sigma = nd$, плоскости с максимальной плотностью точек — это те плоскости, у которых межплоскостное расстояние d максимально.

Пусть $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ — основные векторы трансляции решётки Бравэ. Любое семейство параллельных плоскостей характеризуется вектором обратной решётки \vec{g}_{hkl} :

$$\vec{g}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

где \vec{b}_i — базисные векторы обратной решётки. Из свойств обратной решётки известно, что:

- Вектор \vec{g}_{hkl} перпендикулярен плоскостям (hkl) .
- Межплоскостное расстояние d_{hkl} обратно пропорционально длине этого вектора:

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{g}_{hkl}|}$$

Так как из пункта (а) мы знаем, что $\sigma = n \cdot d$, то для поиска максимальной плотности σ нам нужно найти минимальный по длине ненулевой вектор обратной решётки \vec{g} .

Чтобы минимизировать $|\vec{g}_{hkl}|$, мы ищем такие целые индексы Миллера (h, k, l) , при которых комбинация $h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ даст кратчайший вектор.

ГЦК Решётка, обратная к ГЦК с параметром a , является ОЦК решёткой с параметром $4\pi/a$. Базисные векторы обратной решётки для ГЦК:

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{a}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}), \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{a}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}), \quad \vec{b}_3 = \frac{4\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

В ОЦК решётке кратчайшими векторами являются векторы в узлы типа $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$ в стандартных индексах (соответствует векторам в вершины «куба» обратной решётки). Это соответствует семейству плоскостей $(1, 1, 1)$. Приведено на рис. 5.

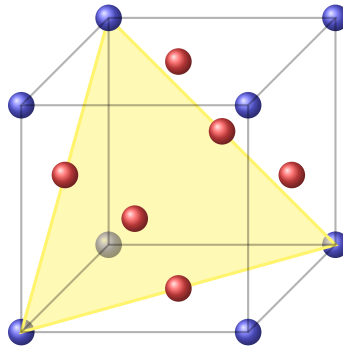


Рис. 5: Семейство плоскостей ГЦК с минимальной плотностью точек

ОЦК Решётка, обратная к ОЦК с параметром a , является ГЦК решёткой с параметром $4\pi/a$. Базисные векторы обратной решётки для ОЦК:

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{a}(\vec{j} + \vec{k}), \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{a}(\vec{i} + \vec{k}), \quad \vec{b}_3 = \frac{4\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j})$$

В ГЦК решётке кратчайшими векторами являются векторы к центрам граней, то есть векторы типа $(\pm 1, \pm 1, 0)$ и их перестановки. Это соответствует семейству плоскостей $(1, 1, 0)$. Приведено на рис. 6.

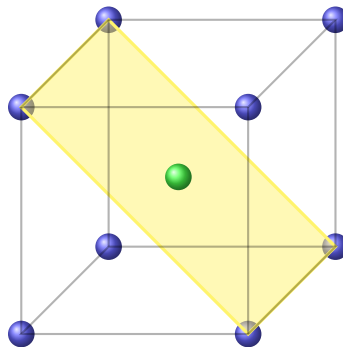


Рис. 6: Семейство плоскостей ОЦК с минимальной плотностью точек

Ответ

1. $\sigma = n \cdot d$
2. Для ГЦК: $(1, 1, 1)$: Для ОЦК: $(1, 1, 0)$ (или другая, полученная перестановкой).

Задача 8

Найдите геометрический структурный фактор моноатомной г.ц.к. решётки Бравэ, представленной в виде простой кубической решётки с четы-

рѣточечным базисом. Установите, какую структуру образуют точки обратной рѣтки с ненулевым структурным фактором. Почему можно было ожидать такой результат?

Решение

Гранецентрированная кубическая (ГЦК) решетка может быть описана как простая кубическая решетка с ребром a , в узлах которой находится базис из 4 атомов. Координаты узлов базиса имеют следующий вид:

$$\begin{cases} \vec{r}_1 = (0, 0, 0) \\ \vec{r}_2 = (1/2, 1/2, 0) \\ \vec{r}_3 = (0, 1/2, 1/2) \\ \vec{r}_4 = (1/2, 0, 1/2) \end{cases}$$

Геометрический структурный фактор определяется формулой

$$S(\vec{b}) = \sum_{j=1}^n e^{-i(\vec{b}, \vec{r}_j)}$$

где \vec{b} — вектор обратной рѣтки, который имеет вид

$$\vec{b} = \frac{2\pi}{a}(h, k, l)$$

где $h, k, l \in \mathbb{Z}$ — индексы Миллера. Подставим и получим

$$S(h, k, l) = 1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{k+l} + (-1)^{h+l}$$

Рассмотрим различные случаи чѣтности степеней экспонент:

1. 3 чѣтные: тогда $S = 4$ — подходит.

Этот случай выполняется, если $(h, k, l, a, b, c \in \mathbb{Z})$:

$$\begin{cases} h + k = 2a \\ k + l = 2b \\ h + l = 2c \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} h = a + c - b \\ k = a + b - c \\ l = b + c - a \end{cases}$$

2. 2 четные, 1 нечѣтная: тогда $S = 2$ — подходит.

Этот случай выполняется, если $(h, k, l, a, b, c \in \mathbb{Z})$:

$$\begin{cases} h + k = 2a + 1 \\ k + l = 2b \\ h + l = 2c \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} h = a + c - b + 1/2 \\ k = a + b - c + 1/2 \\ l = b + c - a \end{cases}$$

Не удовлетворяет условиям целых h, k, l .

3. 1 чѣтная, 2 нечѣтные: тогда $S = 0$ — не подходит.

4. 3 нечётные: тогда $S = -2$ — подходит.

Этот случай выполняется, если $(h, k, l, a, b, c \in \mathbb{Z})$:

$$\begin{cases} h + k = 2a + 1 \\ k + l = 2b + 1 \\ h + l = 2c + 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} h = a + c - b + 1/2 \\ k = a + b - c + 1/2 \\ l = b + c - a + 1/2 \end{cases}$$

Не удовлетворяет условиям целых h, k, l .

Таким образом, все три показателя экспоненты должны быть чётными. Это условие выполняется когда либо все числа из набора (h, k, l) чётные, либо все нечётные.

Этот результат ожидаем из следующих соображений: рассмотрим примеры точек, удовлетворяющих полученному правилу. Это будут точки $(0, 0, 0)$, $(\pm 2, 0, 0)$ с перестановками, и т.д. Если построить эти точки на кубе со стороной 2, то можно видеть, что была получена ОЦК решётка, что можно было ожидать ввиду существования соответствующей теоремы.

(Также, фактически, решение данной задачи может быть найдено в книге «Физика твёрдого тела» (Том 1) за авторством Ашкрофта и Мермина на стр. 114-115 с той лишь оговоркой, что в данной книге оно проводится в обратную сторону относительно поставленной задачи)

Задача 9

Условие

Измельчённые в порошок образцы трёх различных монокристаллических кристаллов анализируются с помощью метода Дебая-Шеррера. Известно, что один из образцов — гранецентрированный кубический, другой — объёмноцентрированный кубический и третий имеет структуру типа алмаза. Примерные положения первых четырёх дифракционных колец характеризуются в каждом случае следующими углами отклонения от направления падения исходного пучка (в градусах):

Образец А: 42.2, 49.2, 72.0, 87.3;

Образец В: 28.8, 41.0, 50.8, 59.6;

Образец С: 42.8, 73.2, 89.0, 115.0;

Определите кристаллическую структуру образцов А, В и С. Если длина волны падающих рентгеновских лучей равна 1.5 \AA , чему равна длина стороны условной кубической ячейки в каждом из указанных случаев?

Решение

Уравнение Вульфа-Брэгга для межплоскостного расстояния d имеет вид:

$$2d \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \lambda$$

Для кубического кристалла с параметром решетки a расстояние d между плоскостями с индексами Миллера (hkl) равно:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Объединяя данные две формулы, получаем выражение для углов дифракции:

$$\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2 + k^2 + l^2) := \frac{\lambda^2}{4a^2} \cdot S$$

Тогда имеем:

ОЦК: Условие максимума: $h + k + l$ — чётное. Тогда последовательность для S примет вид: 2, 4, 6, 8, ... (Т.е. отношение имеет вид: 1 : 2 : 3 : 4 : 5 : ...)

ГЦК: Условие максимума: h, k, l либо все чётные, либо все нечётные. Тогда последовательность S примет вид: 3, 4, 8, 11, 12, ...

Структура типа алмаза: Условие максимума: h, k, l либо все нечётные, либо все чётные и $h + k + l = 4n$. Тогда последовательность значений S примет вид: 3, 8, 11, 16, 19, ...

Тогда требуется преобразовать экспериментальные данные, которые приведены в таблице 1.

Образец	Образец А	Образец В	Образец С
θ	42.2, 49.2, 72.0, 87.3	28.8, 41.0, 50.8, 59.6	42.8, 73.2, 89.0, 115.0
$\sin^2(\theta/2)$	0.129, 0.173, 0.345, 0.476	0.062, 0.123, 0.184, 0.247	0.133, 0.355, 0.491, 0.711
Соотношение	1 : 1.33 : 2.67 : 3.67	1 : 2 : 3 : 4	1 : 2.67 : 3.67 : 5.33
Вывод	ГЦК	ОЦК	Структура алмаза

Таблица 1: Экспериментальные данные

Ответ

Образец А: ГЦК

Образец В: ОЦК

Образец С: Структура типа алмаза

(Задача 1, Глава 6 в «Физика твёрдого тела» (Том 1) за авторством Ашкрофта и Мермина)