

ОГЛАВЛЕНИЕ

| | |
|----------------|---|
| Введение | 8 |
|----------------|---|

Часть I. Кристаллы

| | |
|---|----|
| Лекция 1. Кристаллы. Трансляционная инвариантность | 13 |
| 1.1. Кристаллические решетки | 13 |
| 1.2. Решетки Браве | 17 |
| 1.3. Индексы Миллера | 19 |
| Лекция 2. Волны и квазичастицы в кристаллах | 21 |
| 2.1. Волны. Основные понятия | 21 |
| 2.2. Граничные условия Борна–Кармана | 22 |
| 2.3. Преобразование Фурье | 24 |
| 2.4. Волны и квазичастицы | 26 |
| 2.5. Фазовая и групповая скорости | 28 |
| Лекция 3. Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах | 30 |
| 3.1. Историческое введение | 30 |
| 3.2. Кинематическая теория дифракции | 31 |
| 3.3. Анализ сечения рассеяния | 33 |
| 3.4. Геометрическая интерпретация дифракции рентгеновских лучей | 36 |

Часть II. Основы теории симметрии

| | |
|--|----|
| Лекция 4. Теория симметрии кристаллов | 41 |
| 4.1. Введение в теорию групп | 41 |
| 4.2. Теория представлений групп | 45 |
| 4.3. Простейшие свойства представлений групп | 47 |
| Лекция 5. Теория неприводимых представлений групп и ее применения | 48 |
| 5.1. Неприводимые представления | 48 |
| 5.2. Примеры | 50 |
| 5.2.1. Точечная группа S_2 | 50 |
| 5.2.2. Точечная группа C_s | 51 |
| 5.2.3. Группа вращений трехмерного пространства K | 52 |
| 5.2.4. Группа трансляций в одном измерении T_1 | 53 |
| 5.3. Применения теории групп в квантовой механике | 53 |
| 5.3.1. Правила отбора | 55 |
| 5.3.2. Примеры | 59 |
| 5.4. Анализ функций отклика | 60 |

Часть III. Колебания кристаллических решеток

| | |
|---|-----|
| Лекция 6. Колебания кристаллических решеток | 65 |
| 6.1. Постановка задачи | 65 |
| 6.2. Вывод динамических уравнений | 67 |
| 6.3. Решение динамических уравнений | 69 |
| 6.4. Анализ спектра колебаний решетки | 71 |
| Лекция 7. Элементы теории упругости | 74 |
| 7.1. Элементы теории упругости | 74 |
| 7.2. Модули упругости. Примеры | 78 |
| 7.2.1. Изотропная среда | 78 |
| 7.2.2. Кубический кристалл | 80 |
| Лекция 8. Длинноволновые колебания кристаллических решеток | 82 |
| 8.1. Акустические моды | 82 |
| 8.1.1. Колебания изотропной среды | 83 |
| 8.1.2. Колебания кубического кристалла | 86 |
| 8.2. Оптические колебания в континуальном пределе | 87 |
| Лекция 9. Фононы в кристаллах | 91 |
| 9.1. Фононы: вторичное квантование | 91 |
| 9.2. (*) Технические детали | 93 |
| 9.3. Статистика фононов | 97 |
| 9.4. Теплоемкость кристаллов | 99 |
| Лекция 10. (*) Статистика смещений атомов в кристаллах | 103 |
| 10.1. Среднеквадратичные смещения атомов решетки | 103 |
| 10.2. Неустойчивость одно- и двумерных кристаллов | 105 |
| 10.3. Структурный фактор решетки | 107 |
| 10.4. Ангармонизм решетки и тепловое расширение | 108 |

Часть IV. Электронный спектр кристаллов

| | |
|--|-----|
| Лекция 11. Электронный спектр кристаллов | 113 |
| 11.1. Постановка задачи | 113 |
| 11.1.1. Адиабатическое приближение | 114 |
| 11.1.2. Одноэлектронное приближение | 117 |
| 11.2. Функции Блоха | 117 |
| 11.3. Методы решения одночастичного уравнения Шредингера | 119 |
| 11.3.1. Метод слабо связанных электронов | 120 |
| 11.3.2. Метод сильно связанных электронов | 121 |

| | |
|---|-----|
| Лекция 12. Метод эффективной массы | 126 |
| 12.1. Эффективный гамильтониан | 126 |
| 12.2. Эффективная масса | 130 |
| 12.3. Движение электрона во внешних полях. Теоремы о скорости и ускорении | 132 |
| 12.3.1. Иллюстрация: осцилляции Блоха | 134 |
| 12.4. Метод плавных огибающих | 135 |
| 12.4.1. Иллюстрация: размерное квантование в нанокристалле | 137 |

Часть V. Металлы, диэлектрики и полупроводники

| | |
|---|-----|
| Лекция 13. Статистика носителей заряда | 141 |
| 13.1. Напоминание из прошлого семестра | 141 |
| 13.2. Функция распределения Ферми–Дирака | 143 |
| 13.3. Металлы, диэлектрики, полупроводники | 148 |
| 13.4. Понятие о дырках | 150 |
| 13.5. Статистика электронов и дырок | 152 |
| 13.6. Электронная теплоемкость | 156 |
| 13.6.1. Невырожденный электронный газ | 157 |
| 13.6.2. Вырожденный электронный газ | 158 |
| Лекция 14. Основные положения теории ферми-жидкости Ландау | 161 |
| 14.1. Квазичастицы | 161 |
| 14.2. (*) Энергия квазичастиц и их взаимодействие | 164 |
| 14.3. Время жизни квазичастиц | 167 |
| 14.4. Особенности кулоновского взаимодействия | 169 |
| Лекция 15. Экситоны | 173 |
| 15.1. Еще раз об электронах и дырках | 173 |
| 15.2. Экситоны Ванье–Мотта | 175 |

Часть VI. Транспортные явления

| | |
|---|-----|
| Лекция 16. Рассеяние носителей заряда | 181 |
| 16.1. Общие соотношения | 181 |
| 16.2. Усреднение по случайно расположенным дефектам | 185 |
| 16.3. Парциальная скорость рассеяния | 186 |
| 16.3.1. Рассеяние на ионизованных примесях | 187 |
| 16.3.2. Рассеяние на нейтральных примесях | 188 |
| 16.3.3. Рассеяние на короткодействующем дефекте | 188 |

| | |
|---|-----|
| Лекция 17. Электрон-фононное рассеяние | 189 |
| 17.1. Теория деформационного потенциала | 190 |
| 17.2. Пьезоэлектрическое взаимодействие | 192 |
| 17.3. Фрелиховский механизм взаимодействия с оптическими фононами | 193 |
| 17.4. Расчет темпа электрон-фононного рассеяния | 195 |
| 17.5. Кинематика электрон-фононного рассеяния | 197 |
| Лекция 18. Проводимость электронного газа | 199 |
| 18.1. Кинетическое уравнение | 199 |
| 18.2. Отклик электронов на внешнее электрическое поле | 202 |
| 18.3. Джоулево тепло | 206 |
| Лекция 19. Транспортные эффекты в магнитном поле | 208 |
| 19.1. Магнитосопротивление. Эффект Холла | 209 |
| 19.2. Циклотронный резонанс | 211 |
| 19.3. Квантовая модель циклотронного резонанса. | 213 |
| 19.4. Электронный спиновый резонанс | 214 |
| 19.5. Многочастичные эффекты: теоремы Кона и Лармора | 215 |
| Лекция 20. Квантовый магнитотранспорт | 218 |
| 20.1. Осцилляции Шубникова–де Гааза и квантовый эффект Холла | 218 |
| 20.2. Слабая локализация электронов | 222 |
| Лекция 21. Теплопроводность и диффузия | 225 |
| 21.1. Общая постановка задачи | 225 |
| 21.2. Диффузия | 228 |
| 21.3. Теплопроводность | 232 |
| 21.4. Влияние магнитного поля | 234 |
| 21.5. (*) Соотношения Онзагера. | 234 |

Часть VII. Дополнительные главы физики
конденсированных сред

| | |
|--|-----|
| Лекция 22. Эффект Стюарта–Толмена | 239 |
| Лекция 23. Оптика полупроводников | 241 |
| 23.1. Прямые межзонные переходы | 241 |
| 23.1.1. Разрешенный переход | 244 |
| 23.1.2. Запрещенный переход | 245 |
| 23.2. Непрямые оптические переходы. | 246 |
| 23.3. Обсуждение полученных результатов. | 249 |

| | |
|--|-----|
| Лекция 24. Введение в магнетизм | 251 |
| 24.1. Теорема Борна–ван Лёвен | 251 |
| 24.2. Парамагнетизм | 254 |
| 24.3. Ферромагнетизм | 256 |
| Лекция 25. Фазовые переходы второго рода | 259 |
| 25.1. Фазовые переходы. | 259 |
| 25.1.1. Примеры фазовых переходов второго рода. | 260 |
| 25.2. Теория Ландау фазовых переходов второго рода. | 261 |
| 25.3. Термодинамические характеристики. | 265 |
| 25.4. Восприимчивость по отношению ко внешним полям. | 266 |
| 25.5. Флуктуации параметра порядка и критерии применимости теории Ландау | 268 |
| 25.6. (*) Спонтанное нарушение симметрии и «мягкая мода» | 269 |
| Лекция 26. Квантовые жидкости | 272 |
| 26.1. Конденсация Бозе–Эйнштейна. | 272 |
| 26.2. Волновая функция конденсата. Сверхтекучесть | 275 |
| 26.3. (*) Квантование движения жидкости. | 277 |
| 26.4. Сверхтекучие фермионы. Сверхпроводимость. | 280 |
| Заключение | 285 |
| Вопросы и задачи для самостоятельной работы | 286 |
| Список литературы | 292 |

ВВЕДЕНИЕ

Цель первого семестра курса — сформулировать основные понятия физики твердых тел. Будут приведены необходимые минимальные сведения, которые позволят нам применять теорию симметрии, в частности теорию представлений групп, для анализа физических явлений в кристаллах. В первом семестре также обсуждаются колебательные и электронные спектры конденсированных сред (части I–IV). Второй семестр (части V–VII) посвящен изучению ряда физических явлений в конденсированных средах. Разбиение на лекции является в значительной степени условным.

Конденсированные среды вокруг нас. Не вполне серьезное введение в курс

В быту мы имеем дело с широким кругом конденсированных сред, в который можно включить и жидкости, и твердые тела, и окружающие нас предметы... Как известно, многие из конденсированных сред нашли широкое применение, например, кристалл кремния или спирт. Некоторые конденсированные среды активно исследуются, например, кристалл графена или биологические клетки. Физика, как правило, имеет дело с модельными объектами, такими как знакомые со школьной скамьи материальная точка, идеальный газ, несжимаемая жидкость. Оказывается, что среди всевозможных моделей конденсированных сред особое место занимает модель кристаллической среды или кристалла, где атомы расположены в пространстве периодическим образом (более строгое определение кристалла мы сформулируем позже). Например:

- *Полупроводники*, которые широко используются в приборах: Si, Ge, GaAs, ... — кристаллические. На этих материалах построена вся современная электроника.
- При определенных условиях (низкая температура и плотность) электроны за счет кулоновского взаимодействия между собой могут выстроиться в периодическую в пространстве решетку — *вигнеровский кристалл*.

- Ядерная материя и электроны в *нейтронных звездах* также формируют кристаллические решетки.

Таким образом, кристаллы очень важны, ими мы и займемся. Выбор тем курса в значительной мере определяется основными идеями, которые красной нитью проходят по физике конденсированных сред: симметричный анализ, концепция квазичастиц, метод эффективного гамильтониана, а также личными предпочтениями автора. Разделы, отмеченные звездочкой (*), необязательны при первом прочтении.

Основная литература по курсу

При изучении курса под рукой полезно иметь следующие книги:

1. *Зегря Г.Г., Перель В.И.* Основы физики полупроводников. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009.
2. *Ансельм А.И.* Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978.
3. *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела. М.: Мир, 1979.
4. *Анималу А.* Квантовая теория кристаллических твердых тел. М.: Мир, 1981.
5. *Петрашень М.И., Трифонов Е.Д.* Применение теории групп в квантовой механике. М.: УРСС, 2002.
6. *Бир Г.Л., Пикус Г.Е.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972.
7. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Часть 1. М.: Наука, 1976.

Ссылки на эти и другие источники для более глубокого изучения предмета приведены также по ходу изложения.

Благодарности

Мой приятный долг — выразить благодарность моим учителям, коллегам и ученикам, помогавшим с разработкой этого курса и подготовкой конспекта лекций. Я благодарен Е.Л. Ивченко за помощь и его конспекты по теории симметрии, теории электрон-фононного взаимодействия и теории фазовых переходов второго рода. Я признателен М.А. Семиной за подбор задач, организацию проверок домашних заданий и контрольных работ студентов в первые годы преподавания этого курса. Я выражаю благодарность рецензентам,

прочитавшим рукопись книги и высказавшим ценные замечания и пожелания, а также редактору Е.С. Артоболевской, чьи замечания позволили существенно улучшить изложение материала.

Я благодарен студентам Академического университета, закончившим бакалавриат в 2019–2021 гг., студентам ФТФ ИТМО, закончившим бакалавриат в 2021–2023 гг., и студентам ИТМО и ВШЭ, заканчивающим бакалавриат в 2024 г., на которых этот курс обкатывался. Хочу особенно отметить Фарида Багирова, чьи каверзные вопросы помогли мне лучше структурировать материал, Никиту Леппенена, предоставившего студенческий конспект моих лекций, Дарью Белоусову, Богдана Богданова, Камиля Бурханова, Богдана Жмудя, Кирилла Карасева, Ярослава Квашнина, Михаила Комова, Федора Лисина, Екатерину Лубянкину, Даниилу Рябова, Ольгу Смирнову (которая оказала огромную помощь и будучи аспиранткой ФТИ, проводя семинарские занятия со студентами), Екатерину Ушакову, Никиту Устименко, Вадима Шабашова, Алису Шайхутдинову, Антона Шубника и многих других, которые выловили массу опечаток и неточностей в конспекте. Все оставшиеся ошибки, опечатки и небрежности остаются целиком на моей совести.

Часть I
КРИСТАЛЛЫ

Лекция 1

КРИСТАЛЛЫ. ТРАНСЛЯЦИОННАЯ ИНВАРИАНТНОСТЬ

На первой лекции мы кратко обсудим конденсированные среды и их главных представителей — кристаллы. В основном пойдет речь о трансляционной инвариантности, т.е. пространственной периодичности в расположении атомов в кристаллах. На этой лекции мы также введем некоторые основные понятия и обозначения.

1.1. Кристаллические решетки

Кристаллы характеризуются периодическим распространением атомов в пространстве. Это определение нужно формализовать: атом представляет собой ядро и электронные оболочки, которые в кристаллах перекрываются, также как и при формировании молекул, описанном в курсе химии. Кроме того, все частицы участвуют в тепловом движении. Поэтому для начала мы будем рассматривать ситуацию при нулевой температуре ($T = 0$), а кристалл можно будет определить как среду, где

- ядра расположены периодически (размер ядра $\sim 10^{-13}$ см, а электроны в атомах «размазаны» на масштабе $\gtrsim 10^{-8}$ см, поэтому ядра можно считать точечными на нашем уровне строгости), или
- наблюдаемые величины, такие как плотность массы $\rho(\mathbf{r})$, концентрация электронов $n_e(\mathbf{r})$ или плотность заряда являются периодическими функциями координат $\mathbf{r} = (x, y, z)$.

Определение¹. Периодичность (или трансляционная инвариантность): расположение ядер или электронная плотность переходят сами в себя при трансляции, т.е. параллельном переносе на вектор трансляции \mathbf{a} .

¹ Далее слово «Определение.» будет сокращаться как «О.»

Например,

$$n_e(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = n_e(\mathbf{r}). \quad (1.1)$$

Говорят, что кристаллы обладают *дальним порядком* (*long-range order*). В аморфных телах и жидкостях имеется *ближний порядок* (*short-range order*): есть корреляции в расположении атомов или молекул, но эти корреляции охватывают несколько межатомных расстояний.

При нулевой температуре, как правило, именно периодическое расположение ядер, или, как мы только что обсуждали, периодическая зависимость электронной плотности от координат (1.1), наиболее выгодно энергетически — соответствует минимуму потенциальной энергии взаимодействия в системе электронов и ядер.

Отметим, что свойство периодичности является удобной абстракцией, так как периодичность возможна лишь для бесконечных, неограниченных сред, а мы имеем дело с реальными объектами конечных размеров. Часто, однако, это не очень важно, так как по сравнению с атомными масштабами (и характерными пространственными масштабами, на которых развиваются интересующие нас явления, а это, как мы увидим дальше, нано- и микромаштабы) исследуемые кристаллы — макроскопические объекты. Тем не менее в ряде случаев важны условия на границах кристаллов, про удобный способ выбора граничных условий пойдет речь на следующей лекции.

Как правило, мы будем рассматривать трехмерный случай, поскольку мы живем в трехмерном (координатном) пространстве. Однако в качестве моделей часто будут привлекаться и системы более низких размерностей $d = 2$ или 1 (в нульмерных системах нет трансляций, иначе бы мы рассматривали и $d = 0$), такие низкоразмерные системы также встречаются в природе и могут быть синтезированы в лабораториях.

Итак, в трехмерной системе можно выбрать 3 вектора \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 , не лежащие в одной плоскости, такие, что при смещении кристалла как целого на любой из этих векторов кристалл совмещается сам с собой. Ясно, что трансляции на любую линейную комбинацию векторов \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 с целочисленными коэффициентами

$$\mathbf{a}_{n_1, n_2, n_3} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z} \quad (1.2)$$

также совмещают кристалл сам с собой.

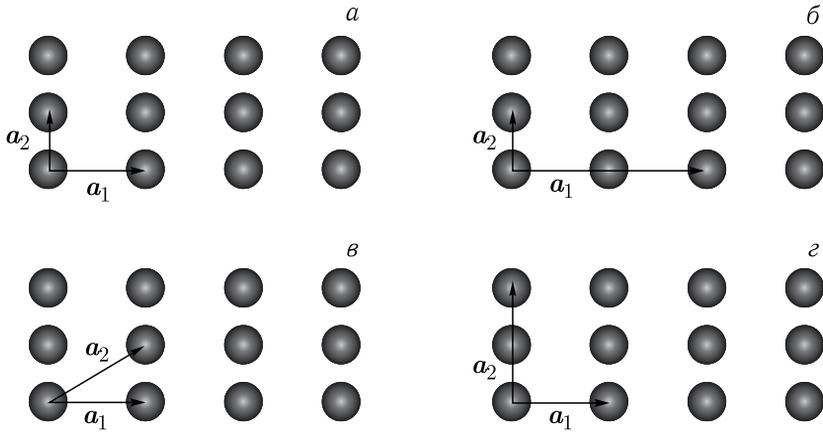


Рис. 1.1. Варианты выбора векторов трансляций для двумерной решетки

Выбор векторов \mathbf{a}_i ($i = 1, 2, 3$), очевидно, неоднозначный (см. рис. 1.1), где для иллюстрации показана двумерная решетка с векторами \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 . Эту неоднозначность следует устранить, хотя бы частично.

О. Назовем *трансляционными* или *масштабными* или *основными* или *базисными* векторами или *трансляционными периодами* наименьшие по длине векторы \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 при их фиксированных направлениях. Будем считать также, что векторы \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 образуют правую тройку (это лишь соображение удобства и привычки).

Такое определение трансляционных векторов, как векторов наименьшей длины при фиксированных направлениях, отсекает варианты (б) и (г) на рис. 1.1.

Введем еще несколько понятий:

О. Параллелепипед, построенный на базисных векторах, называют *элементарной ячейкой* (в англоязычной литературе — *unit cell* — с некоторыми оговорками, о них кратко дальше)².

² Строго говоря, в современной кристаллографии элементарной ячейкой называют такую ячейку, которая обладает теми же элементами симметрии, что весь объем кристалла.

Из линейной алгебры известно, что объем элементарной ячейки выражается в виде смешанного произведения векторов:

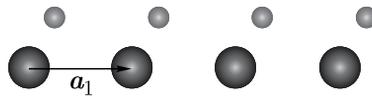
$$v_0 = (\mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]). \quad (1.3)$$

О. Назовем элементарную ячейку минимального объема *примитивной*.

Задача. Предложите способ построения примитивной ячейки для произвольной кристаллической решетки.

Может оказаться так, что в примитивной ячейке есть несколько ядер (иногда говорят про атомы, а не про ядра, имеется в виду одно и то же), а может оказаться, что только одно. На рис. 1.1 — одно ядро, а на рис. 1.2 — два (условно большое и маленькое).

Рис. 1.2. Одномерная решетка с базисом



О. *Базис* — совокупность атомов (ядер) в примитивной ячейке.
О. Решетку называют *простой*, если базис содержит один атом.

О. Введем еще одно важное понятие — *решетка Браве (Bravais lattice)*. Определим ее как набор точек с координатами (1.2):

$$\mathbf{a}_{n_1, n_2, n_3} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z},$$

где $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ — некопланарные векторы. Иногда о решетке Браве говорят просто как о совокупности векторов $\mathbf{a}_{n_1, n_2, n_3}$.

Заметим, что простая кристаллическая решетка совпадает со своей решеткой Браве. В общем случае кристаллическую решетку можно получить

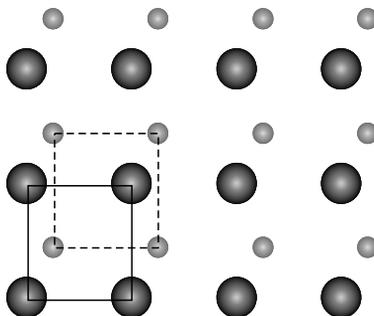


Рис. 1.3. Кристаллическая решетка с базисом из двух атомов

так: взять базис и выполнить трансляции на всевозможные векторы решетки Браве $\mathbf{a}_{n_1, n_2, n_3}$. Есть и альтернативное построение кристалла, при котором решетки Браве, соответствующие различным атомам базиса, вставляются друг в друга (см. рис. 1.3).

В кристаллографии используется термин *кристаллическая структура* — решетка Браве и базис, который повторяется в узлах решетки Браве.

1.2. Решетки Браве

Естественным образом возникает вопрос о том, какие могут быть решетки Браве, т.е. как их классифицировать на основе общих геометрических свойств. Поскольку решетка задается тремя базисными векторами \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 , то самую простую классификацию можно провести по соотношениям между длинами основных векторов и углами между ними (см. обозначения углов на рис. 1.4):

$$\alpha = \angle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_3, \quad \beta = \angle \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \quad \gamma = \angle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2.$$

Исторически это связано с тем, что кристаллы (как правило) имеют огранку, соответствующую плоскостям, построенным на основных векторах.

Такая классификация приведена в табл. 1.1. Указанная классификация не является полной и строгой. Например, требуется различать два возможных типа решетки Браве в гексагональном семействе: собственно гексагональную и тригональную. Более того, данная классификация не может различить разные типы кубических решеток, показанных на рис. 1.5: простую кубическую, гранецентрированную кубическую (ГЦК) и объемноцентрированную кубическую (ОЦК) — это все три решетки Браве. На этом простом примере легко видеть разницу между элементарной ячейкой и примитивной. Для всех трех решеток на рисунке показана элементарная ячейка, и она имеет форму куба. Однако для ГЦК и ОЦК решеток показанная ячейка не является примитивной.

Вопрос: какие базисные векторы задают примитивную ячейку для ГЦК и ОЦК решеток?

Строгая классификация решеток Браве требует применения теории групп, мы изучим соответствующие методы на дальнейших лекциях. Оказывается

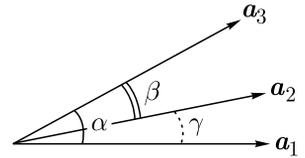


Рис. 1.4. Основные векторы трансляций и углы между ними

Таблица 1.1. Кристаллические семейства и системы (сингонии)

| Кристаллическое семейство | | | Кристаллическая система (сингония) | Точечная группа |
|-----------------------------|---|--|---|----------------------|
| Кубическое (cubic) | $a_1 = a_2 = a_3$ | $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$ | Кубическая (K) | O_h |
| Гексагональное (hexagonal) | $a_1 = a_2 \neq a_3$ $a_1 = a_2 = a_3$ | $\alpha = \beta = \pi/2, \gamma = 2\pi/3$ $\alpha = \beta = \gamma < 2\pi/3 (\neq \pi/2)$ | Гексагональная (H) Тригональная (R) (ромбоэдрическая) | D_{6h} D_{3d} |
| Тетрагональное (tetragonal) | $a_1 = a_2 \neq a_3$ | $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$ | Тетрагональная (Q) (квадратная) | D_{4h} |
| Ромбическое (orthorhombic) | $a_1 \neq a_2 \neq a_3$ | $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$ | Ромбическая (O) (ортогональная) | D_{2h} |
| Моноклинное (monoclinic) | $a_1 \neq a_2 \neq a_3$ | $\alpha = \beta = \pi/2, \gamma \neq \pi/2$ | Моноклинная (M) | C_{2h} |
| Триклинное (triclinic) | $a_1 \neq a_2 \neq a_3$ | $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ | Триклинная (T) | S_2 |

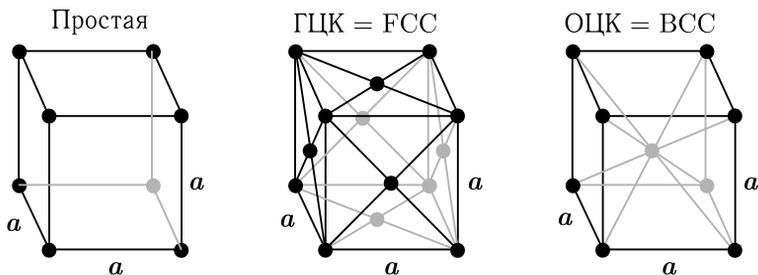


Рис. 1.5. Простая, гранецентрированная (ГЦК или FCC) и объемноцентрированная (ОЦК или BCC) кубическая решетки

(см., например, книгу Г.Л. Бира и Г.Е. Пикуса «Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках» [1]), что существует всего 14 решеток Браве, соответствующих 7 сингониям или кристаллическим системам³.

³ Имеются расхождения, а в ряде случаев и некоторая путаница в терминах *кристаллическое семейство* (*crystalline family*), *кристаллический класс* (*crystalline class*), *кристаллическая система* (*crystalline system*) и *сингония*.

1.3. Индексы Миллера

Для описания свойств кристаллов полезно ввести сокращенные обозначения для плоскостей, проходящих через узлы решетки Браве, а также для направлений в решетке — *индексы Миллера*.

Рассмотрим плоскость в кристалле, проходящую через узлы решетки Браве. Пусть эта плоскость отсекает целочисленные (в единицах длины соответствующего вектора трансляций) отрезки s_1 , s_2 , s_3 вдоль базисных векторов \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 .

О. По определению, индексами Миллера данной плоскости называются минимальные целые числа h , k и l , удовлетворяющие соотношению

$$h/k/l = s_1^{-1}/s_2^{-1}/s_3^{-1}. \quad (1.4)$$

Соответствующая плоскость обозначается как (hkl) (целые числа в круглых скобках).

Если какой-нибудь из индексов отрицателен, то знак «минус» пишут в виде черты сверху. Вот примеры кристаллических плоскостей:

$$(100); \quad (111); \quad (1\bar{1}0); \quad (7\bar{3}\bar{5}).$$

Несложно проверить, что плоскости (hkl) и $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ совпадают. Строго говоря, индексы Миллера (hkl) задают целое семейство параллельных плоскостей, отличающихся лишь трансляцией.

О. Индексами Миллера данного направления \mathbf{a} решетки называют минимальные целые числа h , k и l , такие, что

$$\mathbf{a} = h\mathbf{a}_1 + k\mathbf{a}_2 + l\mathbf{a}_3. \quad (1.5)$$

В кубической решетке вектор $[hkl]$ и плоскость (hkl) перпендикулярны друг другу. В общем случае это не так. Для кубических решеток также вводят обозначения $\langle hkl \rangle$ для всех эквивалентных осей типа $[hkl]$ и $\{hkl\}$ для соответствующего семейства плоскостей. Например, семейство $\{100\}$ включает в себя плоскости (100) , (010) и (001) .

Для обозначений плоскостей и направлений в гексагональных решетках зачастую вводят 4 целых числа h , k , l , и m , причем $h + k + l = 0$, используя

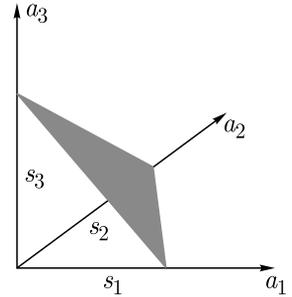


Рис. 1.6. Кристаллическая плоскость, отсекающая отрезки s_1 , s_2 , s_3 вдоль базисных векторов трансляций

«переполненный» набор векторов \mathbf{a}'_0 , \mathbf{a}'_1 , $\mathbf{a}'_2 \perp \mathbf{a}_3$. Вектор \mathbf{a}_3 направлен по выделенной оси (ее еще называют осью c), а векторы \mathbf{a}'_0 , \mathbf{a}'_1 и \mathbf{a}'_2 лежат в перпендикулярной ей плоскости, дают в сумме 0, и получаются один из другого поворотами на угол $2\pi/3 = 120^\circ$.

Наконец, введем еще одно определение очень важного и часто используемого понятия. **О.** *Параметрами решетки* или *постоянными решетки* называют размеры элементарной ячейки. Более строго, для элементарной ячейки в виде параллелепипеда параметрами решетки называют длины его сторон a , b и c . Для кубической решетки $a = b = c \equiv a_0$. В дальнейшем мы будем использовать a или a_0 для обозначения характерного значения параметра решетки.

Конец ознакомительного фрагмента.
Приобрести книгу можно
в интернет-магазине
«Электронный универс»
e-Univers.ru