Задачи домашней контрольной работы:

Раздел 1: Кристаллическая структура.

1. **Коэффициент упаковки**. Показать, что относительная доля объема, занимаемого твердыми шарами, моделирующими атомы, при образовании перечисленных ниже структур имеет следующие значения: для простой кубической 0.52, для объемноцентрированной кубической 0.68, для гранецентрированной кубической 0.74, гексагональной плотноупакованной тоже 0.74, *решетки алмаза – 0.34.

Изображение решетки алмаза:

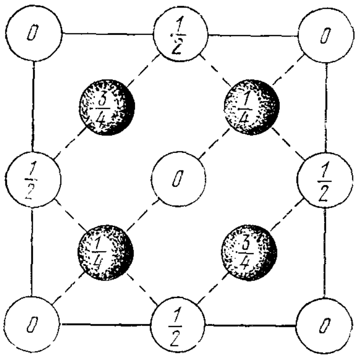
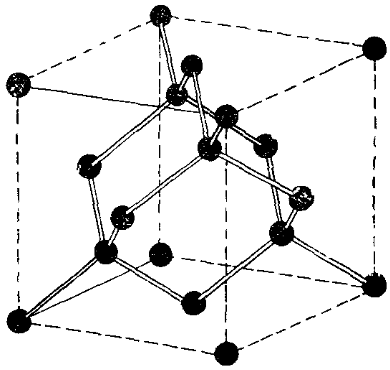


Рис 1.28 Расположение атомов в элементарной кубической ячейке алмаза (проекция на грань куба) Значения дробей указывают высоту атомов над базисной плоскостью (за единицу длины принято ребро куба) Точки с высотой 0 и $1/2$ составляют гранецентрированную кубическую решетку; точки с высотой $1/4$ и $3/4$ образуют такую же решетку, смещенную вдоль пространственной диагонали куба на четверть ее длины Базис состоит из двух одинаковых атомов, имеющих координаты 000 и $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$.



Точные ответы:

Simple cubic	$\pi/6$ (= 0.52)
Body-centered cubic	$\pi 3^{1/2}/8$ (= 0.68)
Face-centered cubic	$\pi 2^{1/2}/6$ (= 0.74)
Hexagonal close-packed	$\pi 2^{1/2}/6$ (= 0.74)
Diamond	$\pi 3^{1/2}/16$ (= 0.34)

2. **Перпендикуляр к плоскости**. Доказать, что в кубическом кристалле направление [hkl] перпендикулярно к плоскости (hkl), имеющей те же индексы Миллера.

3. **Гексагональная структура с плотной упаковкой**, а) Показать, что отношение c/a для идеальной гексагональной структуры с плотной упаковкой равно $(8/3)^{1/2}$= 1,633. Если c/a значительно больше этого значения, то кристаллическую структуру можно рассматривать как состоящую из плотноупакованных атомных плоскостей, уложенных одна на другую довольно рыхло, неплотно. б) Показать, что не может существовать пространственная решетка с гексагональной плотной упаковкой с базисом, состоящим из одного атома на одну точку решетки.

Указание: Показать, что нельзя найти такие векторы решетки **a, Ь, с**, чтобы набор векторов трансляций Т образовал бы решетку с гексагональной плотной упаковкой. Хотя можно выбрать векторы **а** и **Ь**, которые образуют гексагональную сетку в базисной плоскости, однако построить пространственную решетку с гексагональной плотной упаковкой при помощи вектора **с** нельзя.

4. **Зона Бриллюэна ромбической решетки.** Пусть ромбическая решетка имеет три примитивных осевых вектора

$$\mathbf{a} = 5\hat{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{b} = 2\hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{c} = \hat{\mathbf{z}},$$

длины которых выражаются в ангстремах. Определить (а) векторы обратной решетки и (б) размеры и форму первой зоны Бриллюэна.

5. **Гексагональная пространственная решетка.** Векторы примитивных трансляций гексагональной пространственной решетки можно выбрать следующим образом:

$$\mathbf{a} = \frac{\sqrt{3}\,a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{a}{2}\hat{\mathbf{y}} \qquad \mathbf{b} = -\frac{\sqrt{3}\,a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{a}{2}\hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{c} = c\hat{\mathbf{z}}.$$

Найти векторы примитивных трансляций обратной решетки. Показать, что решетка есть ее собственная обратная, но с поворотом осей. На какой угол?

6. **Структурный фактор гранецентрированной решетки.** Базис содержит 4 атома.

а) Найти структурный фактор этого базиса.

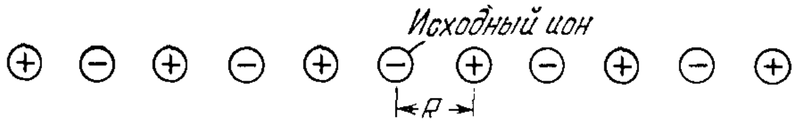
б) Найти индексы разрешенных отражений от ГЦК решетки.

7. **Структурный фактор алмаза.** Кристаллическая структура алмаза описана в задаче 1. Если элементарной ячейкой является обычный куб, то базис содержит восемь атомов.

а) Найти структурный фактор этого базиса.

б) Показать, что индексы разрешенных для структуры алмаза отражений удовлетворяют равенству h + k + l = 4n, где все индексы являются четными целыми числами, а n — произвольное целое число.

8. **Постоянная Маделунга.** Что такое постоянная Маделунга и для чего она нужна? Вычислить постоянную Маделунга для бесконечной цепочки ионов противоположного знака:



Раздел 2: Теория упругости.

9*. **Распространение звуковых волн в кубическом кристалле.*** Из уравнения движения для атомов найти скорость распространения продольной и поперечной звуковой волны в кубическом кристалле в направлении [100].

Указание: В кубическом кристалле имеется только три независимых упругих константы. В обозначениях C_{ij} для упругих констант из книги Киттеля:

$$\begin{aligned}
X_x &= C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy} + C_{13}e_{zz} + C_{14}e_{yz} + C_{15}e_{zx} + C_{16}e_{xy},\\
Y_y &= C_{21}e_{xx} + C_{22}e_{yy} + C_{23}e_{zz} + C_{24}e_{yz} + C_{25}e_{zx} + C_{26}e_{xy},\\
Z_z &= C_{31}e_{xx} + C_{32}e_{yy} + C_{33}e_{zz} + C_{34}e_{yz} + C_{35}e_{zx} + C_{36}e_{xy},\\
Y_z &= C_{41}e_{xx} + C_{42}e_{yy} + C_{43}e_{zz} + C_{44}e_{yz} + C_{45}e_{zx} + C_{46}e_{xy},\\
Z_x &= C_{51}e_{xx} + C_{52}e_{yy} + C_{53}e_{zz} + C_{54}e_{yz} + C_{55}e_{zx} + C_{56}e_{xy},\\
X_y &= C_{61}e_{xx} + C_{62}e_{yy} + C_{63}e_{zz} + C_{64}e_{yz} + C_{65}e_{zx} + C_{66}e_{xy}.
\end{aligned}$$

это

	e_{xx}	e_{yy}	e_{zz}	e_{yz}	e_{zx}	e_{xy}
X_x	C_{11}	C_{12}	C_{12}	0	0	0
Y_y	C_{12}	C_{11}	C_{12}	0	0	0
Z_z	C_{12}	C_{12}	C_{11}	0	0	0
Y_z	0	0	0	C_{44}	0	0
Z_x	0	0	0	0	C_{44}	0
X_y	0	0	0	0	0	C_{44}

Уравнения движения для компонент деформации (***u, v, w*** — компоненты вектора смещения ***R***) имеют вид:

$$\rho\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = C_{11}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) + (C_{12} + C_{44})\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x\,\partial y} + \frac{\partial^2 w}{\partial x\,\partial z}\right),$$

$$\rho\frac{\partial^2 v}{\partial t^2} = C_{11}\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right) + (C_{12} + C_{44})\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x\,\partial y} + \frac{\partial^2 w}{\partial y\,\partial z}\right),$$

$$\rho\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = C_{11}\frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + C_{44}\left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2}\right) + (C_{12} + C_{44})\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x\,\partial z} + \frac{\partial^2 v}{\partial y\,\partial z}\right).$$

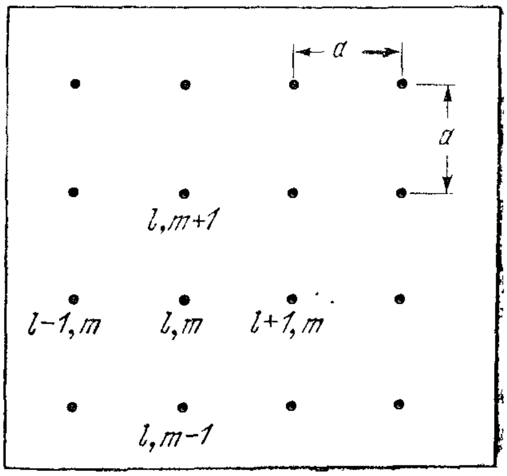
Для нахождения закона дисперсии нужно в эти уравнения подставить выражения для смещений в плоских волнах, распространяющихся вдоль оси x:

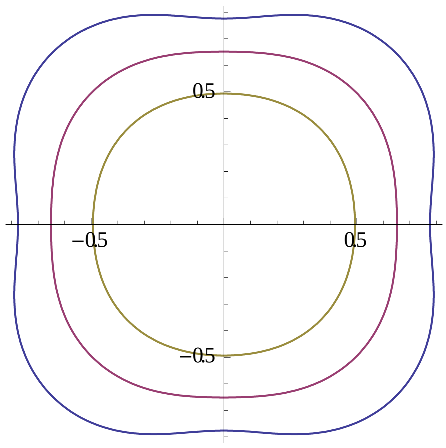
продольной $u = u_0 \exp\left[i\,(Kx - \omega t)\right]$, **и поперечной**

$v = v_0 \exp\left[i\,(Kx - \omega t)\right]$.

Раздел 3: Фононы.

10. Колебания квадратной решетки. Рассмотрим поперечные колебания плоской квадратной решетки, состоящей из рядов и столбцов одинаковых атомов. Обозначим через u_{lm} смещение атома, находящегося на пересечении l-го столбца и m-го ряда, перпендикулярное к плоскости решетки (см. рис.). Масса каждого атома равна M, а C — силовая постоянная для атомов, являющихся ближайшими соседями.





а) Показать, что уравнением движения является

$$M\frac{d^2u_{lm}}{dt^2}=C\left[(u_{l+1,\,m}+u_{l-1,\,m}-2u_{lm})+(u_{l,\,m+1}+u_{l,\,m-1}-2u_{lm})\right].$$

б) Предположить, что решения имеют форму

$$u_{lm}=u(0)\exp\{i(lK_xa+mK_ya-\omega t)\},$$

где a — расстояние между атомами, являющимися ближайшими соседями. Показать, что уравнение движения удовлетворяется, если

$$\omega^2M=2C(2-\cos K_xa-\cos K_ya).$$

Это соотношение есть дисперсионный закон для данной задачи.

в) Показать, что область $\boldsymbol{K}$-пространства, для которой существуют независимые решения, может быть взята в виде квадрата со стороной $2\pi/a$. Это есть первая зона Бриллюэна квадратной решетки. Начертить график зависимости ω от K для $K=K_x$ с $K_y=0$ и для $K_x=K_y$.

г) для $Ka \ll 1$ показать, что

$$\omega=(Ca^2/M)^{1/2}\left(K_x^2+K_y^2\right)^{1/2}=(Ca^2/M)^{1/2}K.$$

д)* Найти анизотропию скорости звука.

Раздел 4: Тепловые свойства решетки. (задачи 11, 12 и 13*)

6.1. Теплоемкость одномерной решетки (линейной цепочки). Показать, что в дебаевском приближении теплоемкость одномерной решетки из одинаковых атомов пропорциональна T/θ при низких температурах ($T \ll \theta$). Здесь θ — эффективная дебаевская температура одномерной решетки, определяемая соотношением $\theta = \hbar\omega_{max}/k_B = \hbar\pi v_0/k_B a$, где k_B — постоянная Больцмана, a — межатомное расстояние.

6.2. Энергия и функция распределения. Показать, что выражение для средней энергии системы можно представить в следующем виде:

$$\langle E\rangle = k_B T^2 \frac{d \ln Z}{dT},$$

где Z — интеграл состояний, который для классической одномерной системы по определению равен

$$Z = \iint \exp\left[-E(p, x)/k_B T\right] dp\, dx;$$

здесь p — импульс.

6.3. Теплоемкость ангармонического осциллятора. Исходя из выражения для ангармонического потенциала $U(x) = cx^2 - gx^3 - fx^4$, показать, что теплоемкость классического ангармонического осциллятора описывается приближенным выражением

$$C \approx k_B\left[1 + \left(\frac{3f}{2c^2} + \frac{15g^2}{8c^3}\right) k_B T\right].$$

(**Подсказка для последней задачи**: использовать формулу из предыдущей задачи и взять интегралы по p и по x, считая ангармонические члены в потенциале малыми).