

Kvantová fyzika pevných látek

Přednáška 2: Základy krystalografie

Pavel Márton

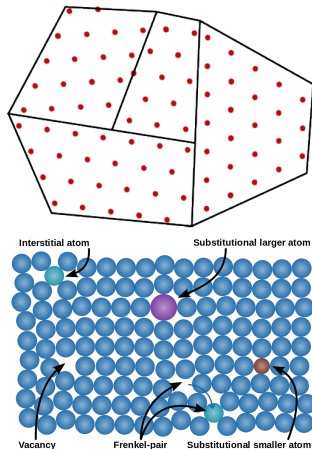
30. října 2013

Pevná fáze

- Skupenství (pevné, kapalné & plynné)
- Pevné skupenství je charakterizováno
 - Tuhostí
 - Těsně, pravidelně (*krystaly*) nebo nepravidelně (*amorfní látky*) vázanými atomy.
 - Atomovou a elektronovou strukturou... materiálové vlastnosti (vodivost elektrická a tepelná, tvrdost, odrazivost, lesk ...)

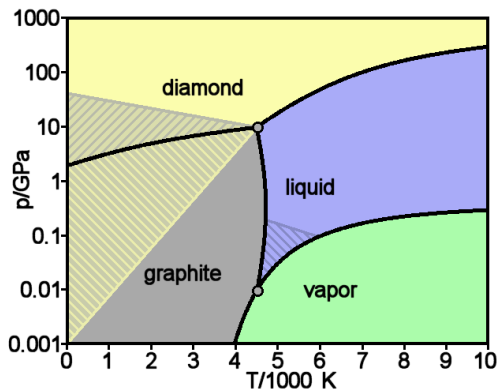
Reálné pevné látky

- Většina je polykrystalická ()
- Přesto, i když jsou zrna malá, pouze velmi malé procento z celkového počtu je blízko hranicím zrn.
- Reálné pevné látky obsahují množství defektů různých typů
- V následujícím zanedbáváme vliv povrchů, čárových a bodových defektů.
- Nicméně, vliv defektů na některé materiálové vlastnosti může být určující (např. vodivost, elektronová struktura, ...)



Ideální krystal

- Nekonečně opakovaná skupiny atomů (uspořádání na dlouhou vzdálenost)
- Struktura závisí na vnějších podmínkách
- Fáze a fázové přechody mezi nimi

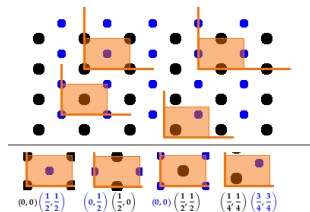
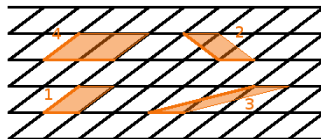


Obrázek: Fázový diagram uhlíku

(http://serc.carleton.edu/research_education/equilibria/phaserule.html
http://en.wikipedia.org/wiki/File:Carbon_basic_phase_diagram.png)

Krystalová struktura

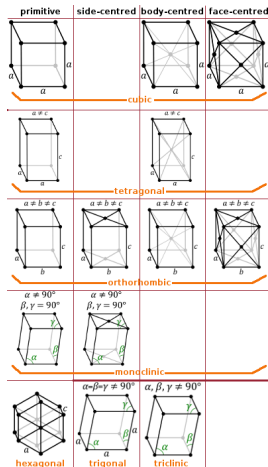
- Krystalová struktura = krystalová mřížka + báze
- Mřížka
 - Translační symetrie $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + u_1\mathbf{a}_1 + u_2\mathbf{a}_2 + u_3\mathbf{a}_3$ (u_i jsou celá čísla, \mathbf{a}_i translační vektory (krystalové mřížky))
 - Atomové uspořádání je totožné z perspektivy libovolného bodu \mathbf{r}' krystalové mřížky.
- Báze
 - Skupina atomů náležející každému mřížkovému bodu
- Primitivní buňka. Primitivní translační vektory, primitivní mřížka: libovolný bod ze kterého krystal vypadá stejně, může být vyjádřen s využitím $\{u_i\}$. (alternativně, translační vektory obepínají minimální objem)
- Wigner-Seitz primitivní buňka (Speciální volba primitivní buňky)



Obrázek: Krytalová mřížka a báze
<http://users.aber.ac.uk/ruw/teach/334/crystal.php>, <http://us>

Bravaisova mřížka

- Symetrie krystalu – translace, rotace, inverse (zrcadlení)
- Bravaisova mřížka má stejnou bodovou grupu symetrie jako krystal sám.
- 14 Bravaisových mřížek, 230 prostorových grup symetrie
- Prostá kubická = SC (koordinační číslo 6 (KČ)), Kubická prostorově centrovaná (KČ 8), Kubická plošně centrovaná (KČ 4)
- Diamant (sp^3 vazba), Grafit (sp^2 vazba)

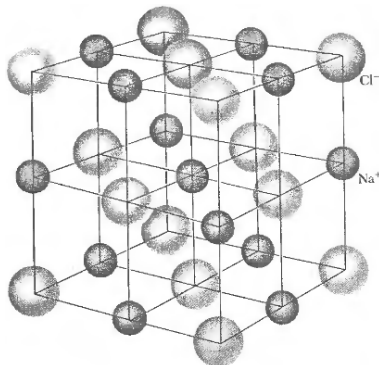


Obrázek: Bravaisovy mřížky

<http://users.aber.ac.uk/ruw/teach/334/bravais.php>

Struktura kamenne soli

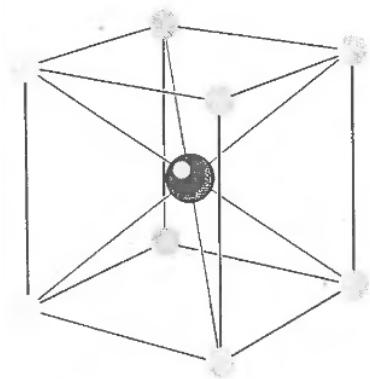
- FCC (kubická plošně centrovaná)
- Báze: Cl^- na pozici 000 a Na^+ na pozici $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
- Frakční koordináty



Obrázek: NaCl_{ISSP}

Struktura CsCl

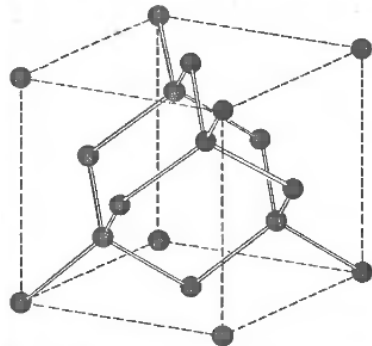
- SC (prostá kubická)
- Báze: Cs⁺ na pozici 000 a
Cl⁻ na pozici $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$



Obrázek: CsCl_{ISSP}

Diamantová struktura

- FCC (kubická plošně centrovaná)
- Báze: C na pozici 000 a na pozici $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$
- ... a struktur je mnohem více (binární, ternární sloučeniny).



Obrázek: NaCl_{ISSP}

Taylorův rozvoj, harmonická aproximace

- Taylorova řada

- Vyjádření funkce v blízkosti zvoleného bodu x_0 s využitím funkční hodnoty a hodnoty derivací funkce v tomto bodu
- $f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2!}f''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{3!}f'''(x_0)(x - x_0)^3 + \dots$
- Často používáno ve fyzice pro získání zjednodušených (aproximativních) vztahů

- Harmonická aproximace

- Taylorův rozvoj potenciální energie:
- $V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{3!}V'''(x_0)(x - x_0)^3 + \dots$
- Pokud je v bodě x_0 minimum energie, potom platí $V'(x_0) = 0$. Tedy první člen rozvoje je kvadratický v blízkosti bodu x_0 je často (ne vždy) možno zanedbat členy vyšších řádů.
- Tzv. lineární režim, harmonická aproximace (potenciál je parabola, tomu odpovídá lineární vratná síla, viz harmonický oscilátor v KM1)
- Pozor na oblast platnosti harmonické aproximace, někdy jsou členy vyšších řádů (anharmonické členy) nezanedbatelné!