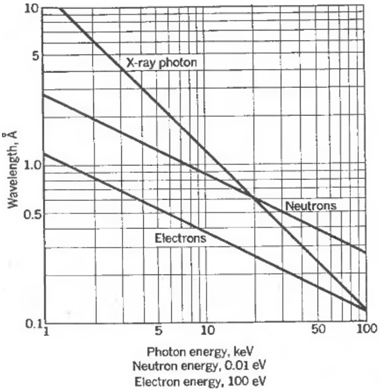
Kvantová fyzika pevných látek

Přednáška 4: Elastický rozptyl na krystalové mřížce, Braggův zákon

Pavel Márton

30. října 2013

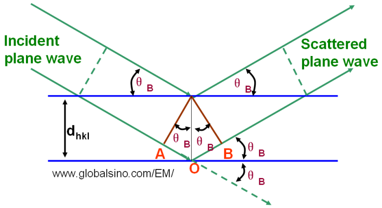
- Krystaly jsou studovány pomocí fotonů, neotronů a elektronů (citlivé na různé aspekty struktury).
- Optické vlnové délky (≈500nm) vedou k obyčejnému odrazu/lomu. Mechanismus: odražená vlna je superpozicí vln rozptýlených elasticky jednotlivými atomy.
- Menší vlnové délky, srovnatelné s mřížkovou konstantou, mohou býto ohnuty, odchýleny, také do jiných směrů než by odpovídalo odrazu/lomu.
- Difrakční obrazce byly vysvětleny Braggem.

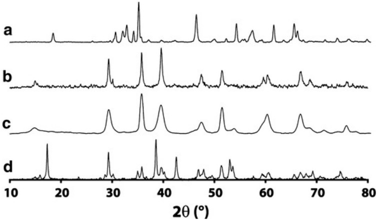


Obrázek: Vlnová délka versus enrgie pro různé částice používané pro studium materiálů ISSP

Braggův zákon

- Braggovo vysvětlení: příchozí monochromatická vlna je odražena slabě jednotlivými atomovými rovinami. Pro některé směry odražené vlny interferují konstruktivně, pro jiné destruktivně.
- Braggova podmínka konstruktivní interference: $2dsin(\theta) = n\lambda$
- To může být splněno pouze pro $\lambda \leq 2d$
- Jednoduché vysvětlení, výborná shoda s experimentem.
- Příspěvek k difraktované vlně je od $10^3 - 10^5$ atomových rovin, v závislosti na materiálu.
- Atomová báze určuje relativní intensitu difrakce (může dokonce způsobit vymizení některých bodů díky negativní interferenci). To vede k tzv. výběrovým pravidlům.





Nahoře: http://www.globalsino.com/EM/page3882.html Dole: rentgenový difraktogram La_2O_3 (a) and LaOCl (c) a po dehydrochloraminaci na (b), (d) (Heiden et al., Catalyst letter **122**, 238 (2008)).

Fourierova analýza

- Translační invariance krystalové mřížky.
- Translační invariance elektronové hustoty svázané s mřížkou.
- Např. elektronová hustota: $n(\mathbf{r}+\mathbf{T}) = n(\mathbf{r})$, where $\mathbf{T} = u_1\mathbf{a_1} + u_2\mathbf{a_2} + u_3\mathbf{a_3}$
- Přímočará analýza s využitím Fourierových řad
  - 1D: $n(x) = \sum_p n_p exp[2\pi i \frac{px}{a}]$ (+ podmínka $n^\star_{-p} = n_p$, p je celé číslo)
  - 3D: $n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} n_{\mathbf{G}} exp[i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}]$

    $n_{\mathbf{G}} = \frac{1}{V_{\mathrm{cell}}} \int_{\mathrm{cell}} n(\mathbf{r}) exp[-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}] dV$
- **G** musí být zvoleno tak, aby splňovalo $n(\mathbf{r}+\mathbf{T}) = n(\mathbf{r})$.

Reciproká mřížka

- Reciproká mřížka je definována jako $\mathbf{G} = v_1\mathbf{b_1} + v_2\mathbf{b_2} + v_3\mathbf{b_3}$ (v_i celá čísla, $\mathbf{b_i}$ jsou vektory reciproké mřížky)
- Jednotlivé primitivní vektory reciproké mřížky $\mathbf{b}_i$ jsou vyjádřeny pomocí primitivních vektorů přímé mřížky $\mathbf{a}_j$

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$$

- Vektory $\mathbf{b}_i$ a $\mathbf{a}_j$ splňují $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$
- Je splněna podmínka $n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = n(\mathbf{r})$? Ano!
- Tedy: každá krystalová struktura může být asociovaná s dvěma mřížkami:
  - krystalová mřížka (přímý prostor)
  - reciproká mřížka (prostor směrů, Fourierův prostor)

Obecná difrakční podmínka

- Množina reciprokých mřížkových vektorů **G** určuje možné rentgenové difrakce
- Příchozí a rozptýlená vlna $\mathbf{k} = 2\pi/\lambda$.
- Amplituda rozptýlené elektromagnetické vlny je úměrná rozptylové amplitudě $F = \int n(\mathbf{r}) exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}] dV = \int n(\mathbf{r}) exp[-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] dV$
- Zde $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ je rozptylový vektor (obecně $k \neq k'$). S využitím Fourierova rozkladu n(**r**) dostáváme $F = \sum_{\mathbf{G}} \int n_{\mathbf{G}} exp[i(\mathbf{G} - \Delta\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}] dV$
  - F je zanedbatelně malé pokud se $\Delta\mathbf{k}$ významně liší od vektoru reciproké mřížky.
  - $F = Vn_{\mathbf{G}}$ pokud $\Delta\mathbf{k}$ je vektorem reciproké mřížky.
- Obecná difrakční podmínka: $\Delta k = \mathbf{G}$.
- Pro elastický rozptyl platí $k = k'$, tedy $k^2 = (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2$. Potom je difrakční podmínka $2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} + G^2 = 0$
- Mimochodem, jedná se o elastický rozptyl, tedy hybnost se zachovává. Co se stane s hybností vlny?