

„Fizyka materii skondensowanej i struktur półprzewodnikowych” (1101-4FS22)

Tomasz Kazimierczuk

Zakład Fizyki Ciała Stałego
Instytut Fizyki Doświadczalnej
Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski

Sieć odwrotna a płaszczyzny sieciowe

Twierdzenie 1

Wektor sieci odwrotnej $\vec{R}_{[h,k,l]}^*$ jest prostopadły do płaszczyzny sieciowej $(h\ k\ l)$

Dowód:

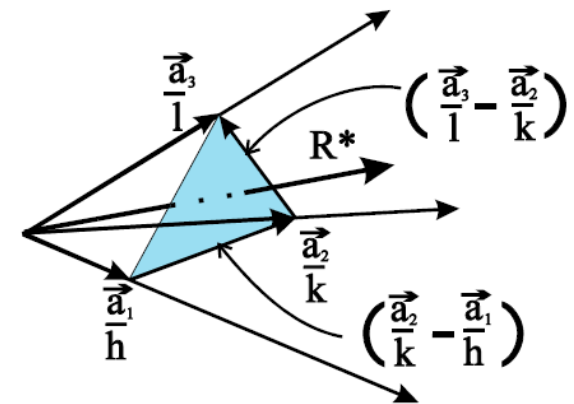
Weźmy 2 dowolne, liniowo niezależne wektory leżące w płaszczyźnie $(h\ k\ l)$, np.:

$$\vec{R}_a = \left(\frac{\vec{a}_2}{k} - \frac{\vec{a}_1}{h} \right), \quad \vec{R}_b = \left(\frac{\vec{a}_3}{l} - \frac{\vec{a}_2}{k} \right)$$

wystarczy teraz pokazać, że wektor $\vec{R}_{[h,k,l]}^*$ jest do nich prostopadły:

$$\vec{R}_{[h,k,l]}^* \cdot \left(\frac{\vec{a}_2}{k} - \frac{\vec{a}_1}{h} \right) = -h\vec{a}_1^* \cdot \frac{\vec{a}_1}{h} + k\vec{a}_2^* \cdot \frac{\vec{a}_2}{k} = -2\pi + 2\pi = 0$$

$$\vec{R}_{[h,k,l]}^* \cdot \left(\frac{\vec{a}_3}{l} - \frac{\vec{a}_2}{k} \right) = -k\vec{a}_2^* \cdot \frac{\vec{a}_2}{k} + l\vec{a}_3^* \cdot \frac{\vec{a}_3}{l} = -2\pi + 2\pi = 0$$



Sieć odwrotna a płaszczyzny sieciowe

Twierdzenie 2

Odległość $d_{(hkl)}$ pomiędzy sąsiednimi płaszczyznami $(h k l)$ jest równa:

$$d_{(hkl)} = \frac{2\pi}{|\vec{R}_{[h,k,l]}^*|}$$

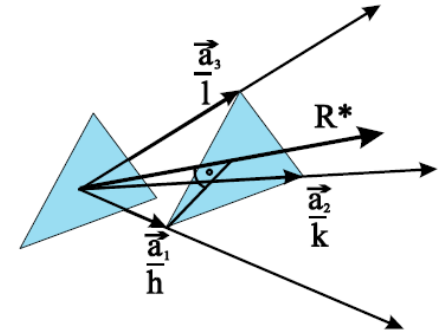
Dowód:

Równania dwóch sąsiednich płaszczyzn $(h k l)$:

$$h \frac{x}{a_1} + k \frac{y}{a_2} + l \frac{z}{a_3} = 0 \quad \text{oraz} \quad h \frac{x}{a_1} + k \frac{y}{a_2} + l \frac{z}{a_3} = 1$$

Niech $h \neq 0$; wtedy odległość $d_{(hkl)}$ można wyznaczyć jako rzut wektora \vec{a}_1 / h na kierunek wektora $\vec{R}_{[h,k,l]}^*$:

$$d_{(hkl)} = \frac{\vec{a}_1}{h} \cdot \frac{\vec{R}_{[h,k,l]}^*}{|\vec{R}_{[h,k,l]}^*|} = \frac{\vec{a}_1 \cdot (h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^*)}{h |\vec{R}_{[h,k,l]}^*|} = \frac{2\pi}{|\vec{R}_{[h,k,l]}^*|}$$



Sieć odwrotna a warunki Laue'go

- Rozpraszanie elastyczne fali (np. promieniowania X);
- Zmiana wektora falowego przy rozpraszaniu:

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k}' \quad \Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$$

- Interferencja konstruktywna od wszystkich węzłów rozpraszających zachodzi, gdy:

$$\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}_1 = 2\pi m_1$$

$$\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}_2 = 2\pi m_2$$

$$\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}_3 = 2\pi m_3$$

warunki
Laue'go

czyli:

$$\Delta\vec{k} = \vec{G}$$

$$\vec{G} = m_1 \vec{a}_1^* + m_2 \vec{a}_2^* + m_3 \vec{a}_3^* \quad \text{– wektor sieci odwrotnej}$$

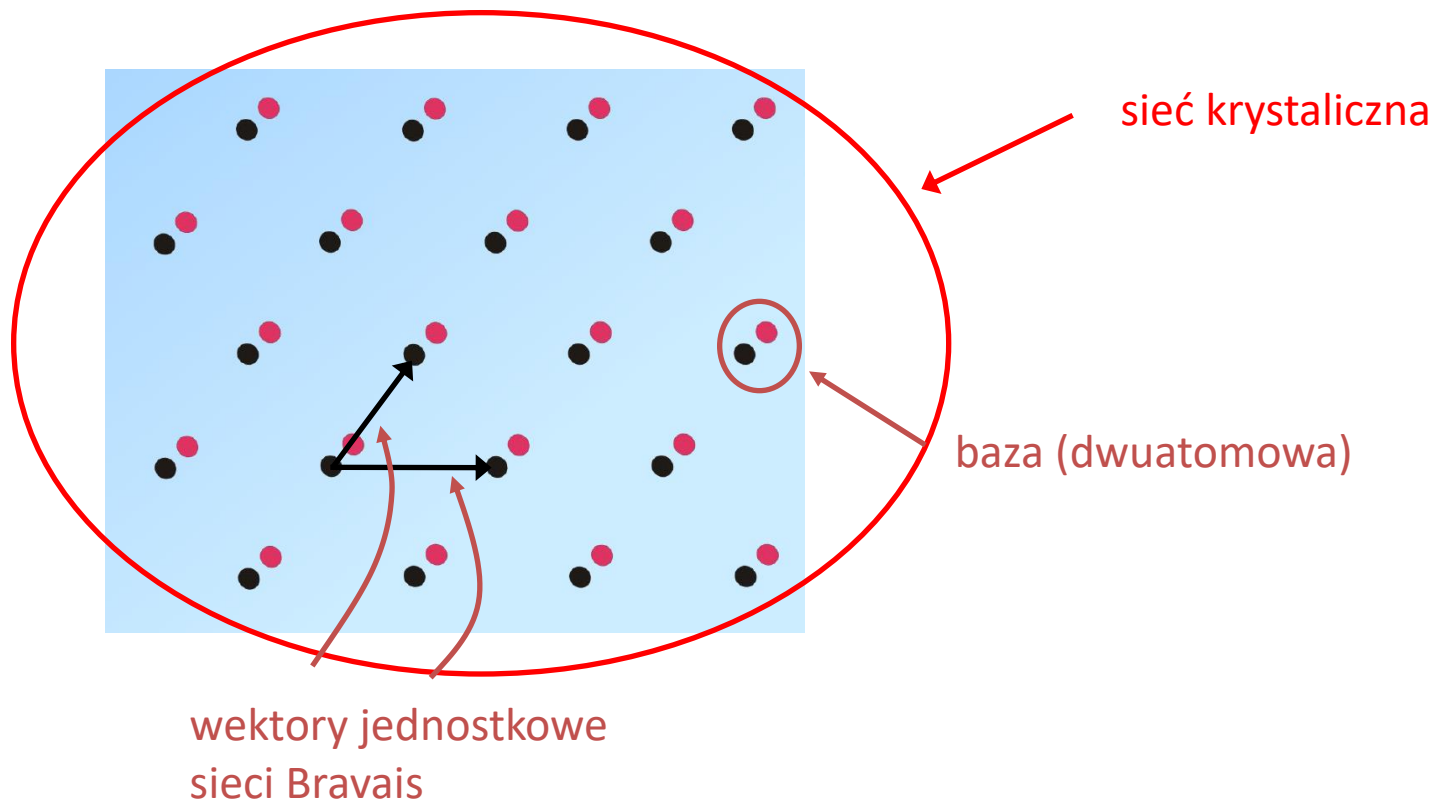
Typy sieci Bravais, układy krystalograficzne

Układ	cechy		Typy sieci Bravais
Trójskośny	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	trójskośna
Jednoskośny	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = \pi/2 \neq \beta$	jednoskośna P, jednoskośna C
Rombowy	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	rombowa P rombowa C rombowa I rombowa F
Tetragonalna	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	tetragonalna P tetragonalna I
Heksagonalny*	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \pi/2, \gamma = 2\pi/3$	heksagonalna P romboedryczna
Regularny	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	regularna P regularna I regularna F

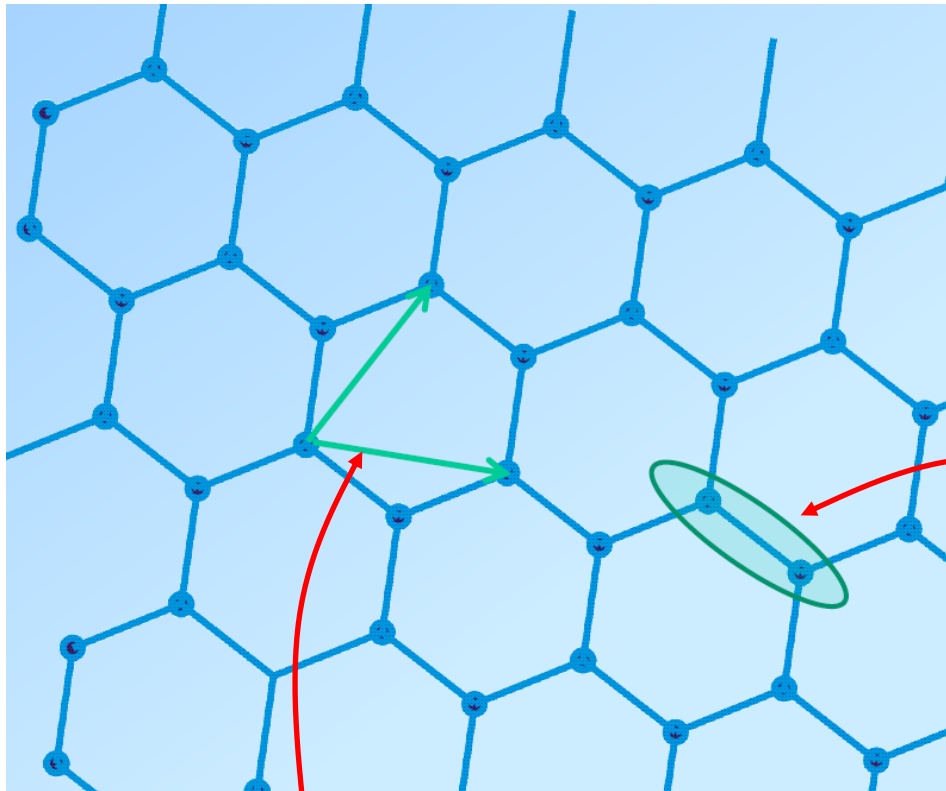
P – sieć prosta (lub prymitywna), **C** – o centrowanych podstawach, **I** – przestrzennie/objętościowo (lub wewnątrznie) centrowana, **F** – ściennie (lub płasko) centrowana

Sieć krystaliczna

- **Sieć krystaliczna** – każdemu węzłowi sieci Bravais przyporządkowany jest **atom lub grupa atomów** (takich samych bądź innych). Atomy te stanowią **bazę tej sieci**.



Sieć krystaliczna



Grafen

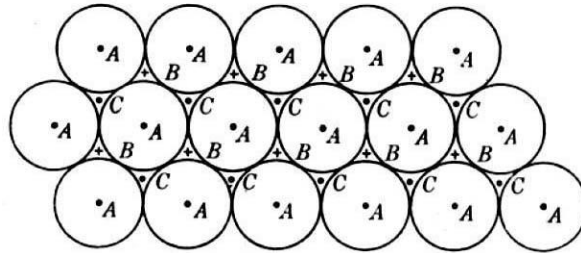
baza

wektory jednostkowe

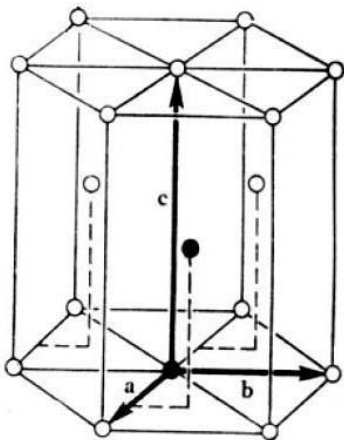
Przykłady struktur krystalicznych

- *Struktury gęstego upakowania*

(LK=12)



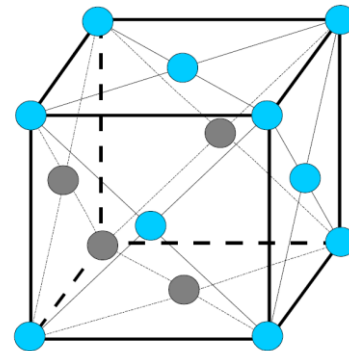
(AB)-(AB)



hcp

- Sieć Bravais – heksagonalna
- baza dwuatomowa
- np.: Ti, Co, He

(ABC)-(ABC)



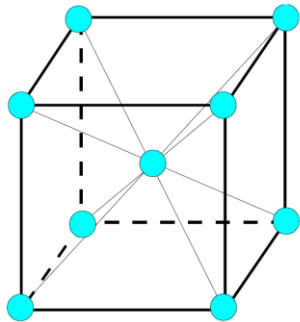
fcc

- Sieć Bravais – regularna płasko centrowana
- baza jednoatomowa
- np.: Au, Ag, Cu, Ne, Ar

Przykłady struktur krystalicznych

- *Struktura regularna centrowana objętościowo (bcc)*

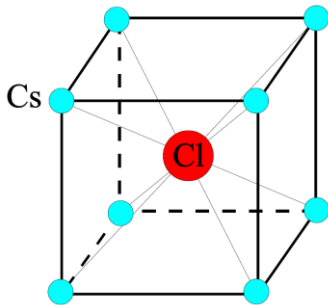
(LK=8)



- Sieć Bravais – regularna centrowana objętościowo
- baza jednoatomowa
- np.: Cs, Li, K, Na, Fe, W

- *Struktura chlorku cezu*

(LK=8)

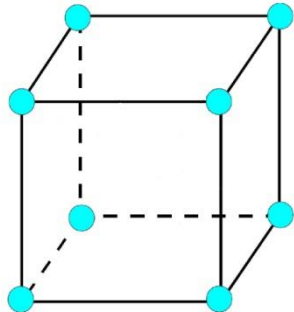


- Sieć Bravais – regularna prosta
- baza dwuatomowa
- np.: CsCl

Przykłady struktur krystalicznych

- *Struktura prosta regularna (sc)*

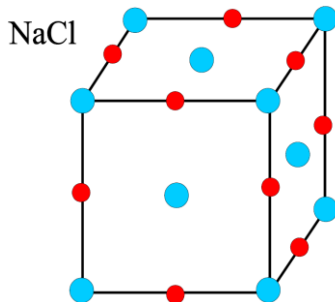
(LK=6)



- Sieć Bravais – prosta regularna
- baza jednoatomowa
- np.: Po

- *Struktura NaCl*

(LK=6)

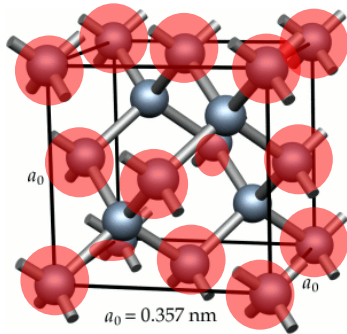


- Sieć Bravais – regularna płasko centrowana
- baza dwuatomowa
- dwie podsieci Na i Cl, każda z nich fcc, przesunięte względem siebie o połowę boku lub połowę głównej przekątnej
- np.: NaCl i wiele innych kryształów jonowych

Przykłady struktur krystalicznych

- *Struktura diamentu*

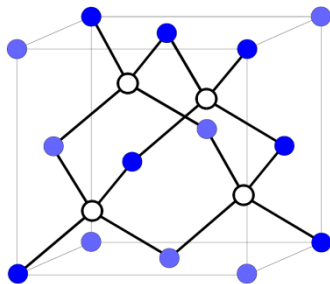
(LK=4)



- Sieć Bravais – regularna płasko centrowana
- baza dwuatomowa utworzona z jednakowych atomów (jeden atom w węzle sieci Bravais, drugi w $\frac{1}{4}$ głównej przekątnej)
- np.: C, Si, Ge

- *Struktura ZnS (blendy cynkowej)*

(LK=4)

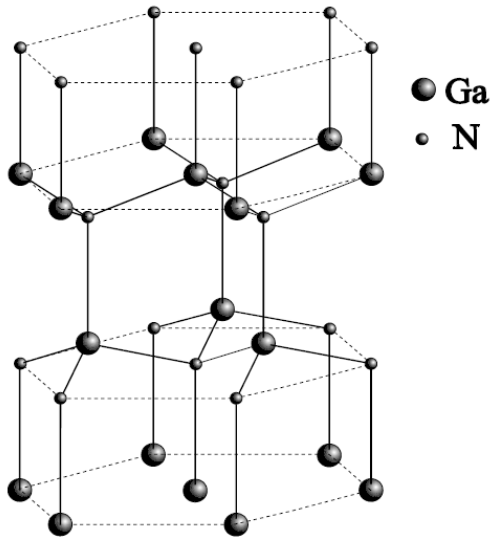


- Sieć Bravais – regularna płasko centrowana
- baza dwuatomowa utworzona z różnych atomów (jeden atom w węzle sieci Bravais, drugi w $\frac{1}{4}$ głównej przekątnej)
- np.: GaAs, CdTe

Przykłady struktur krystalicznych

- *Struktura wurcytu*

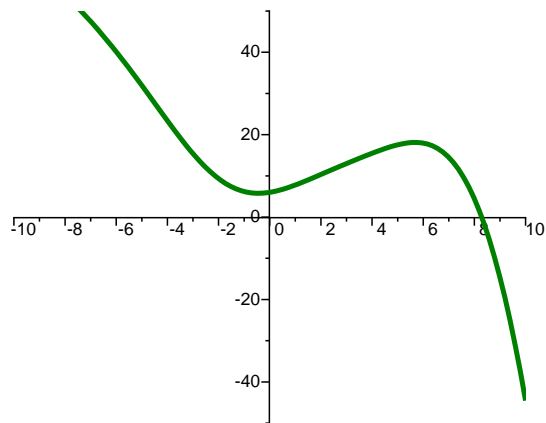
(LK=4)



- Sieć Bravais – heksagonalna hcp
- baza czteroatomowa utworzona z różnych atomów
- struktura o wiązaniach tetraedrycznych
- dwie sieci hcp przesunięte względem siebie wzdłuż osi c – podsieć anionowa i kationowa
- np.: CdS, ZnO, GaN

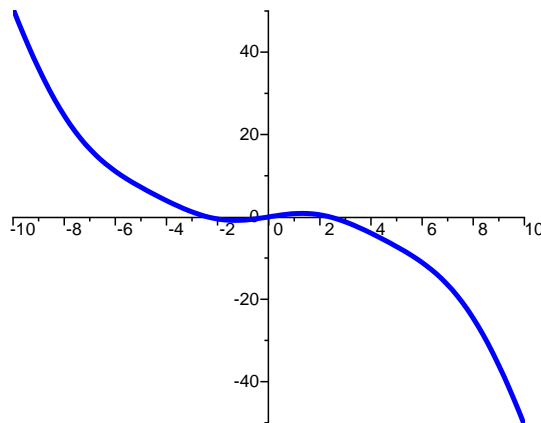
Oś symetrii $x=0$

$f(x)$



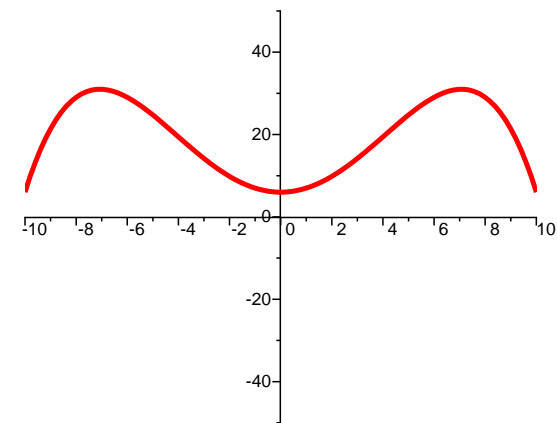
=

Część
antysymetryczna



+

Część
symetryczna



Symetrie punktowe

Operacje symetrii danego obiektu – przekształcenia nie zmieniające wyglądu tego obiektu

Symetrie punktowe – takie, dla których operacje symetrii zachowują przynajmniej jeden punkt przestrzeni

Podstawowe punktowe operacje symetrii:

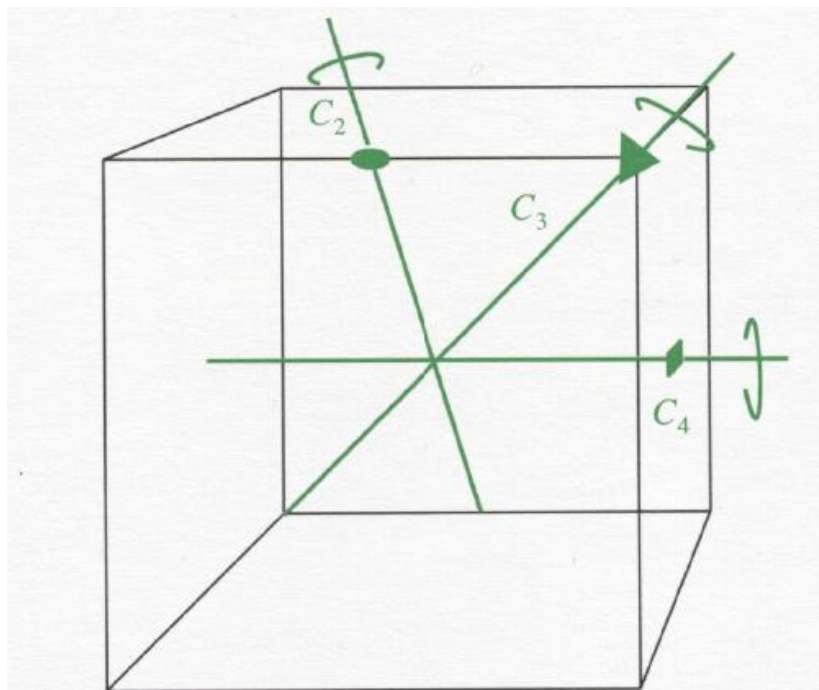
- Obroty właściwe
- Inwersja
- Odbicie zwierciadlane
- Obroty niewłaściwe (obrót i następujące po nim odbicie od płaszczyzny \perp do osi)
- Obroty inwersyjne (obrót i następująca po nim inwersja)

lub:

- \Rightarrow *osie obrotu*
- \Rightarrow *środek inwersji*
- \Rightarrow *płaszczyzna zwierciadlana*
- \Rightarrow *osie obrotów niewłaściwych*
- \Rightarrow *osie inwersyjne*

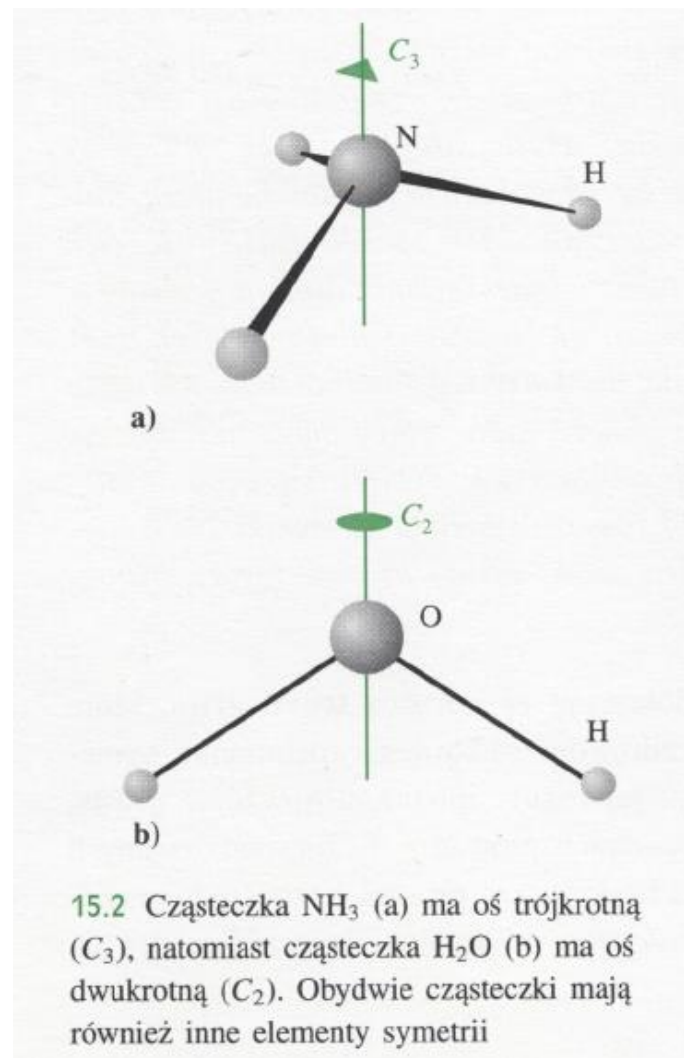
Elementy symetrii, względem których wykonywane są dane operacje symetrii:

Symetrie punktowe - obroty



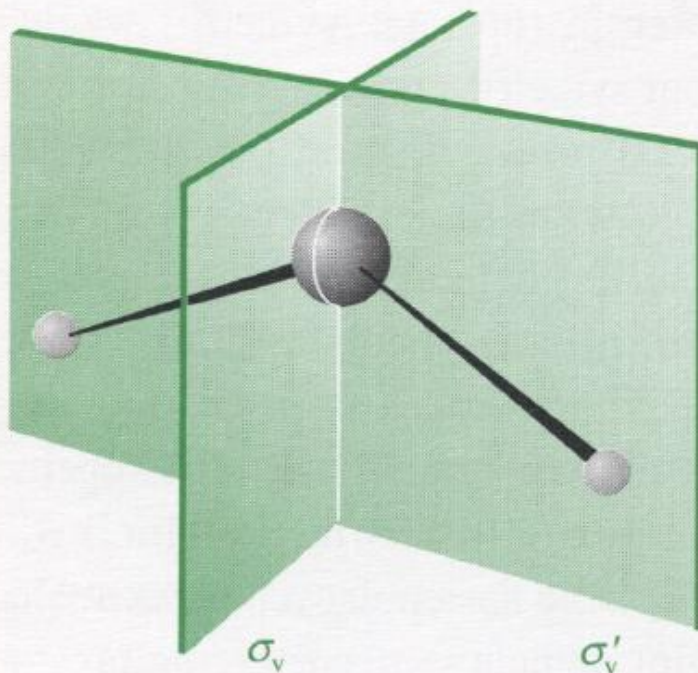
15.1 Niektóre elementy symetrii sześcianu. Oś dwukrotna, trójrotna i czterokrotna zostały oznaczone zgodnie z obowiązującą konwencją

P.W. Atkins, Chemia fizyczna



15.2 Cząsteczka NH₃ (a) ma oś trójrotną (C_3), natomiast cząsteczka H₂O (b) ma oś dwukrotną (C_2). Obydwie cząsteczki mają również inne elementy symetrii

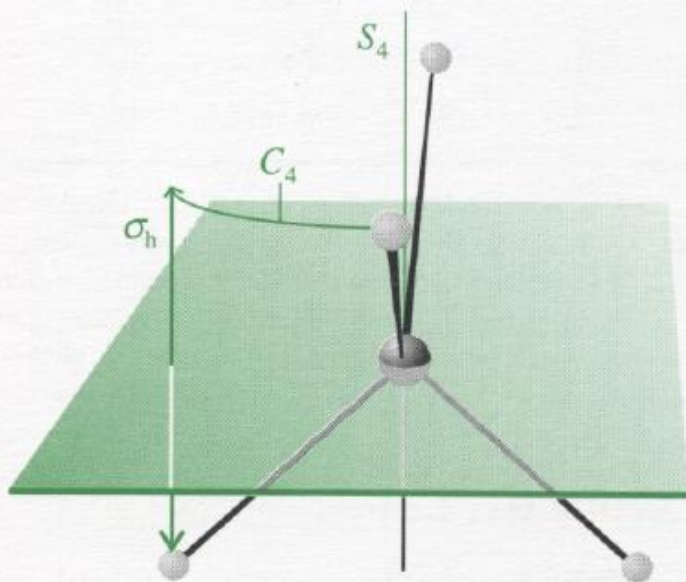
Symetrie punktowe - odbicia



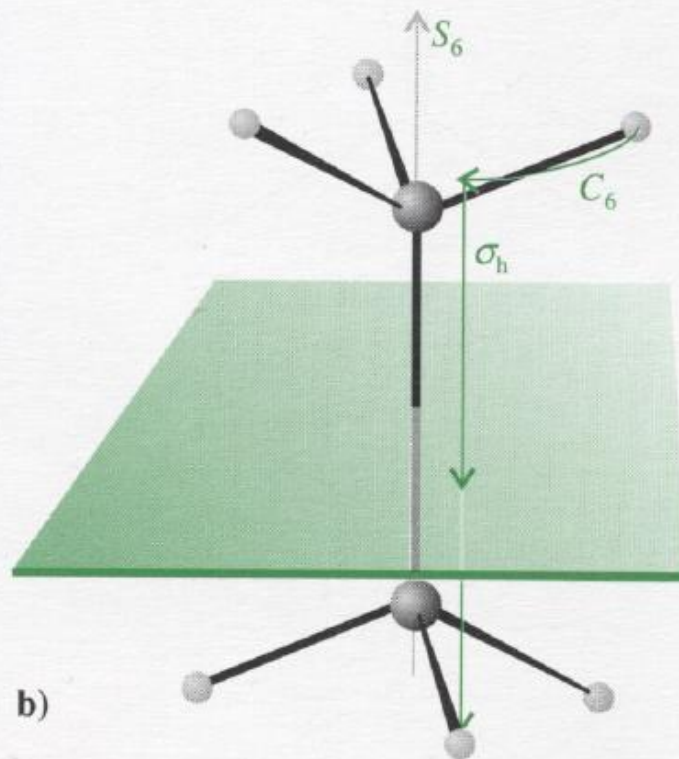
15.3 Cząsteczka H_2O ma dwie płaszczyzny zwierciadlane. Obydwie są płaszczyznami wertykalnymi (tzn. zawierają oś główną), oznacza się je więc jako σ_v i σ'_v

P.W. Atkins, Chemia fizyczna

Symetrie punktowe – obroty niewłaściwe



a)

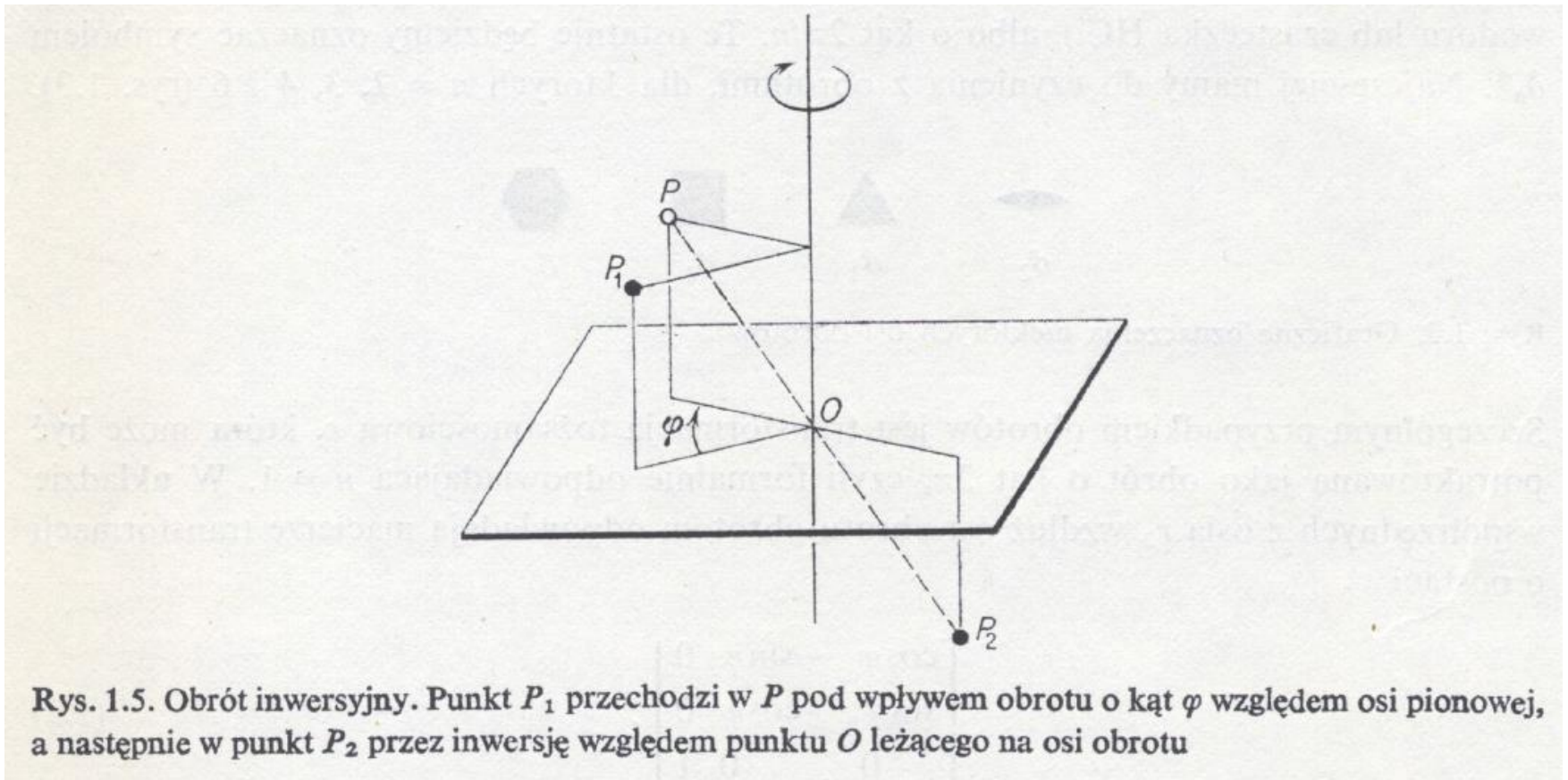


b)

15.6 a) Cząsteczka CH_4 ma czterokrotną oś niewłaściwą (S_4); cząsteczka ta jest nieodróżnialna po obrocie o 90° i następującym po nim odbiciu w płaszczyźnie horyzontalnej, ale żadna z tych operacji z osobna nie jest operacją symetrii cząsteczki. b) Etan w konformacji naprzemianległej ma oś S_6 , która jest złożeniem obrotu o kąt 60° i odbicia

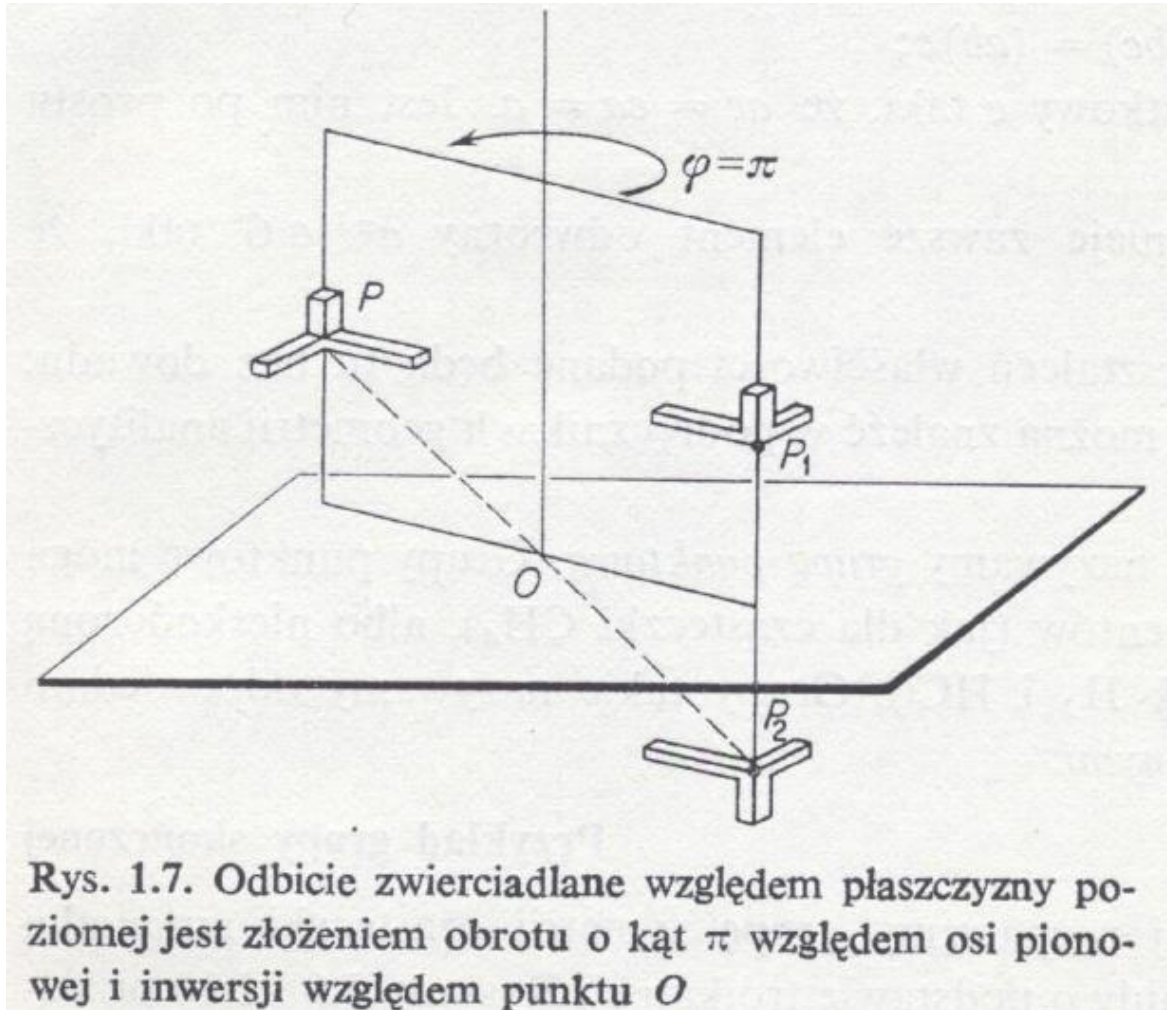
P.W. Atkins, Chemia fizyczna

Symetrie punktowe – obroty inwersyjne



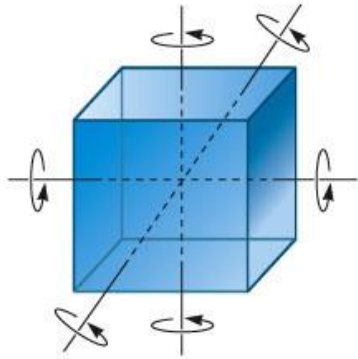
J. Ginter, Wstęp do fizyki atomu, cząsteczki i ciała stałego

Symetrie punktowe – obroty inwersyjne

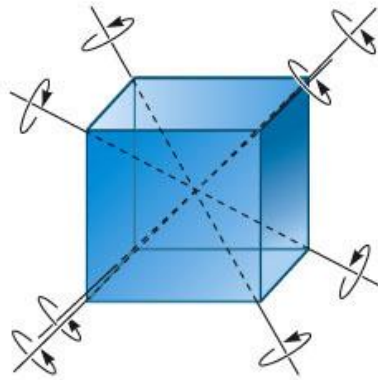


J. Ginter, Wstęp do fizyki atomu, cząsteczki i ciała stałego

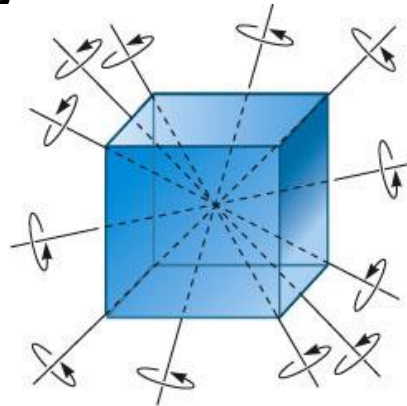
Podstawowe symetrie sześciangu



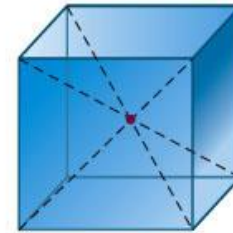
Three 4-fold axes



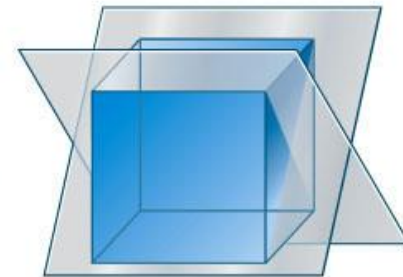
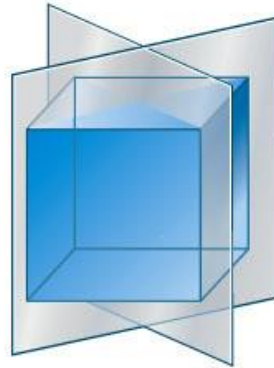
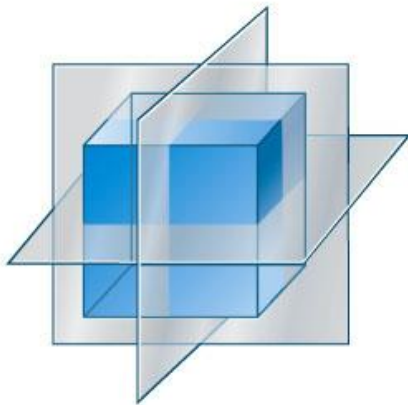
Four 3-fold axes



Six 2-fold axes



Center of inversion



Nine mirror planes

© 2007 Thomson Higher Education

http://www.nyu.edu/classes/tuckerman/honors.chem/lectures/lecture_20/node1.html

Stosowane oznaczenia

Element symetrii	Schönflies (cząsteczki)	Hermann- Mauguin (kryształy)	Streitwolf (kryształy)	Operacja
Tożsamość	E	1	ε	1-krotny obrót
Oś obrotu	C_n	n	δ_n	n-krotny obrót ($360^\circ/n$)
Płaszczyzna symetrii	σ	m	ρ	odbicie
Środek symetrii	i	$\bar{1}$	i	inwersja
Oś obrotu niewłaściwego	S_n	—	—	n-krotny obrót + odbicie
Oś obrotu inwersyjnego	—	\bar{n}	σ_n	n-krotny obrót + inwersja

W kryształach możliwe są osie obrotu 1-, 2-, 3-, 4- i 6-krotne

Grupy punktowe

Zbiór wszystkich punktowych operacji symetrii danego obiektu, wraz z działaniem polegającym na składaniu tych operacji ***tworzą grupę***

Grupy punktowe

(według: P. Kowalczyk, „Fizyka cząsteczek”)

Zbiór elementów G oraz działanie (mnożenie grupowe) tworzą grupę, jeśli:

- w zbiorze G istnieje element jednostkowy e , taki że $e \bullet a = a \bullet e = a$
- każdy element zbioru a ma w tym zbiorze element odwrotny a^{-1} , taki że $a^{-1} \bullet a = a \bullet a^{-1} = e$
- mnożenie grupowe jest łączne: $a \bullet (b \bullet c) = (a \bullet b) \bullet c$

Mnożenie grupowe nie musi być przemienne. Jeśli jest – grupa nazywa się **przemienną lub abelową**

Liczba elementów grupy nazywa się **rzędem grupy**

Grupy punktowe

	<i>e</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>f</i>
<i>e</i>	<i>e</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>f</i>
<i>a</i>	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>e</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>c</i>
<i>b</i>	<i>b</i>	<i>e</i>	<i>a</i>	<i>f</i>	<i>c</i>	<i>d</i>
<i>c</i>	<i>c</i>	<i>f</i>	<i>d</i>	<i>e</i>	<i>b</i>	<i>a</i>
<i>d</i>	<i>d</i>	<i>c</i>	<i>f</i>	<i>a</i>	<i>e</i>	<i>b</i>
<i>f</i>	<i>f</i>	<i>d</i>	<i>c</i>	<i>b</i>	<i>a</i>	<i>e</i>

- rząd tej grupy wynosi 6
- grupa jest nieprzemienne
- np.: $c \bullet a = d$
 $a \bullet c = f$

P. Kowalczyk, Fizyka cząsteczek