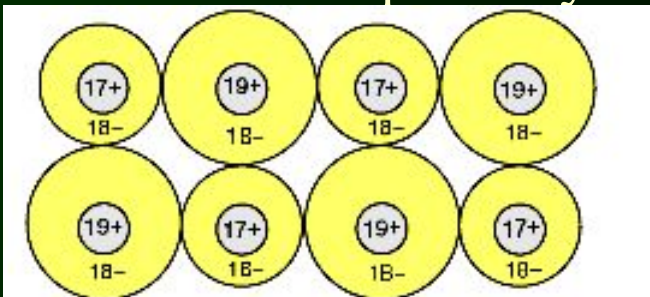


# Кристаллическая структура

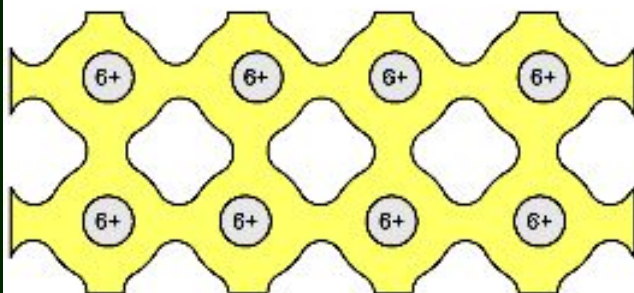
Связь атомов в кристалле

1912 г. М. фон Лауэ. Дифракция

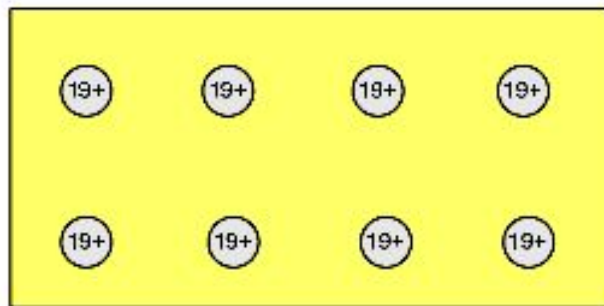
рентгеновского излучения на кристаллах.



Ионный кристалл

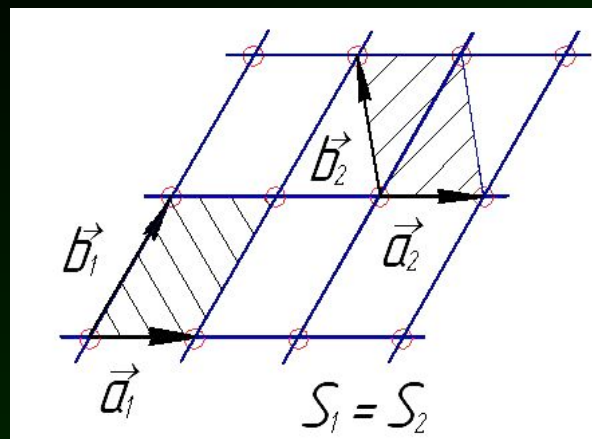
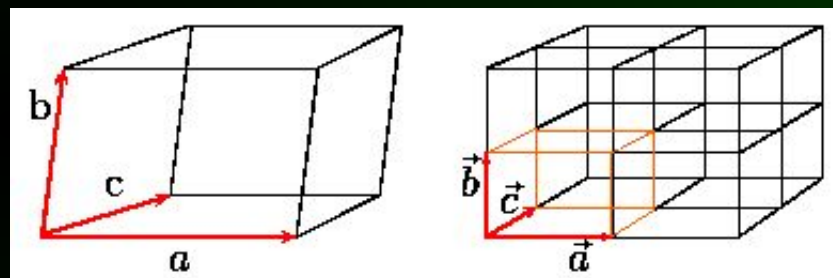


Ковалентный кристалл

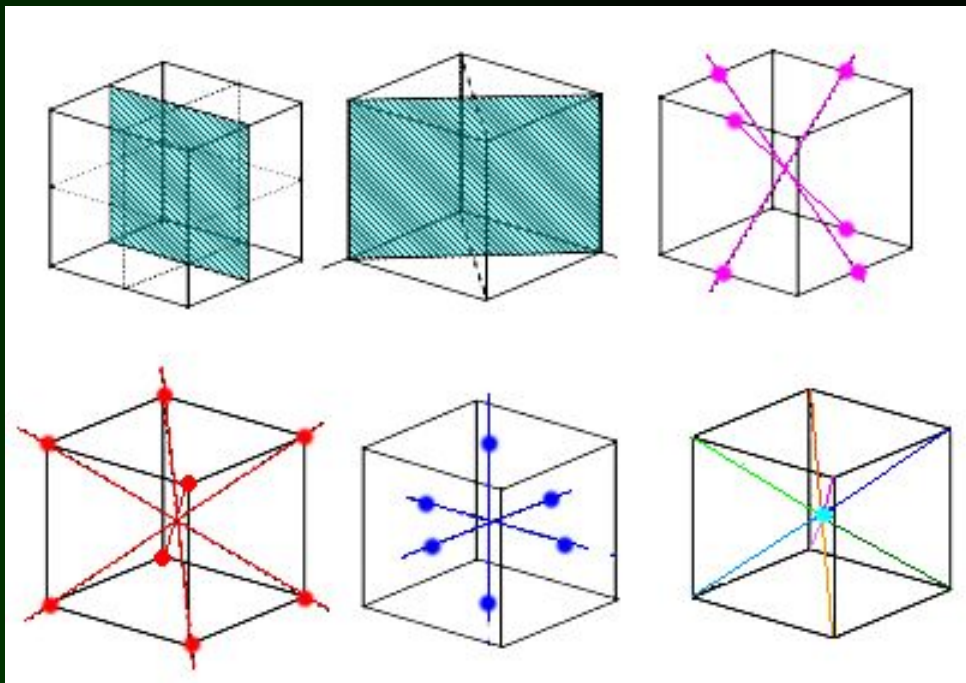
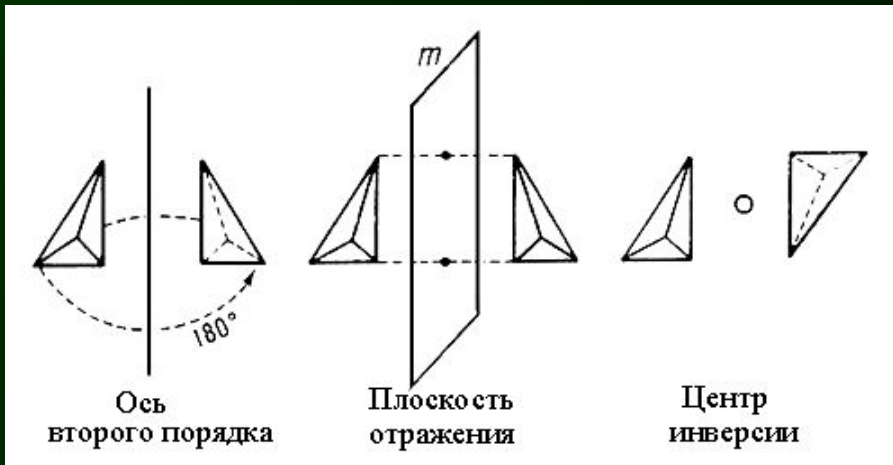


Металл

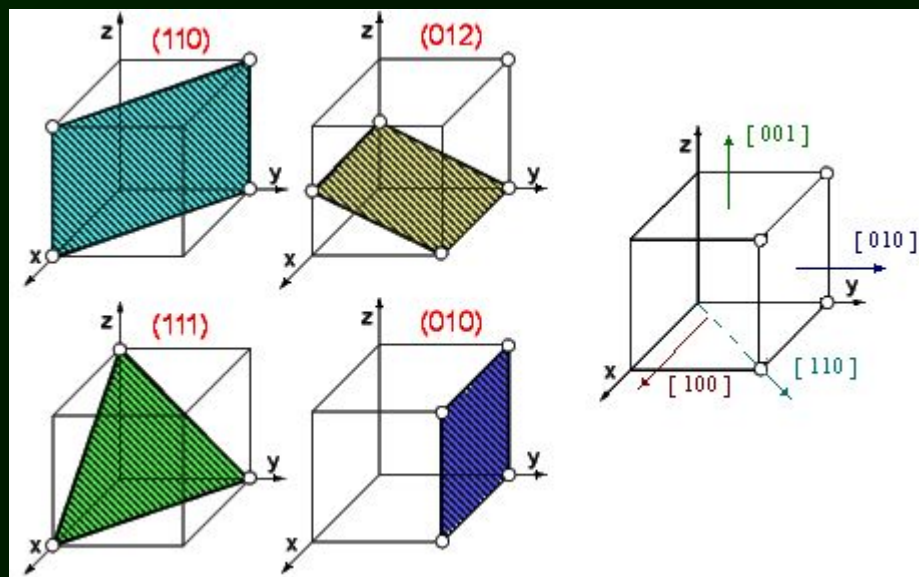
## Вектора трансляции



# Симметрия кристаллов



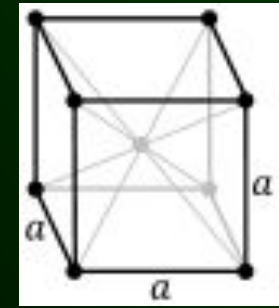
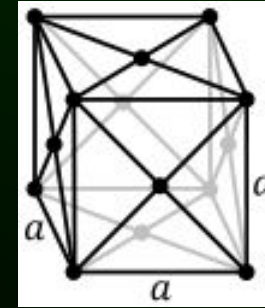
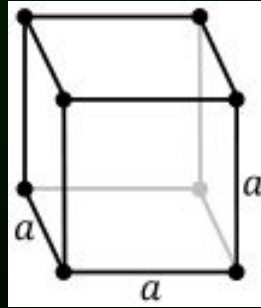
# Индексы Миллера



# Решетки Браве

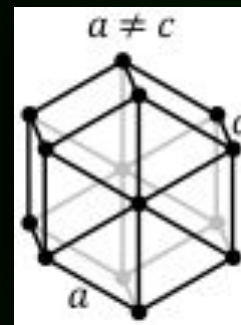
Кубическая

$$a = b = c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



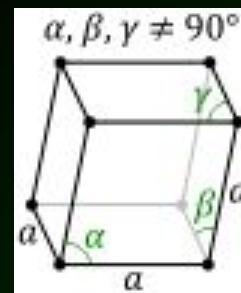
Гексагональная

$$a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$$



Тригональная (ромбоэдрическая)

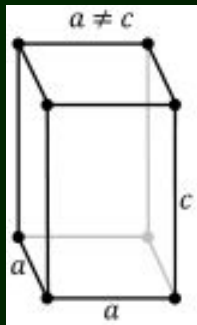
$$a = b = c; \alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$$



# Решетки Браве

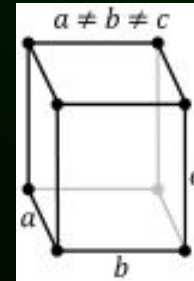
Тетрагональная

$$a = b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



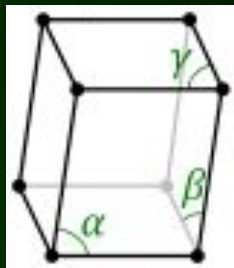
Ромбическая

$$a \neq b \neq c; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



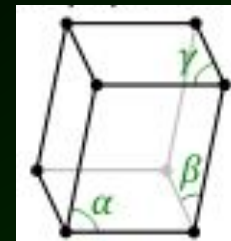
Моноклинная

$$a \neq b \neq c; \alpha \neq \gamma \neq 90^\circ, \beta = 90^\circ$$

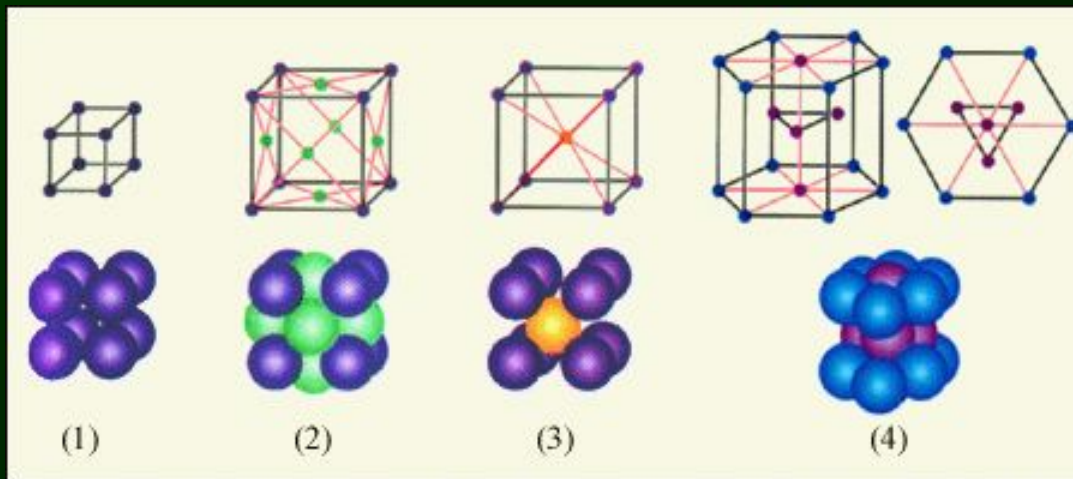


Триклинная

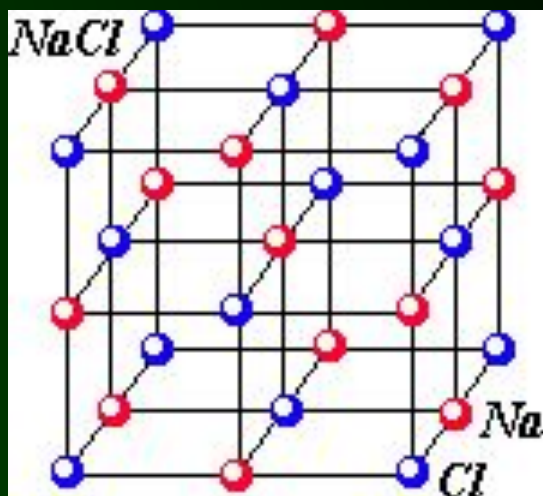
$$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



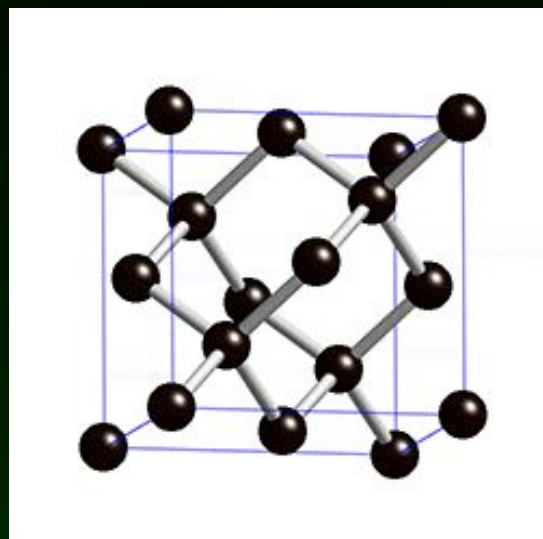
# Сложные решетки



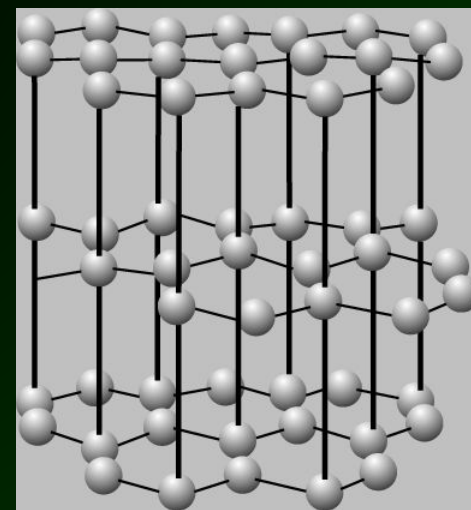
NaCl



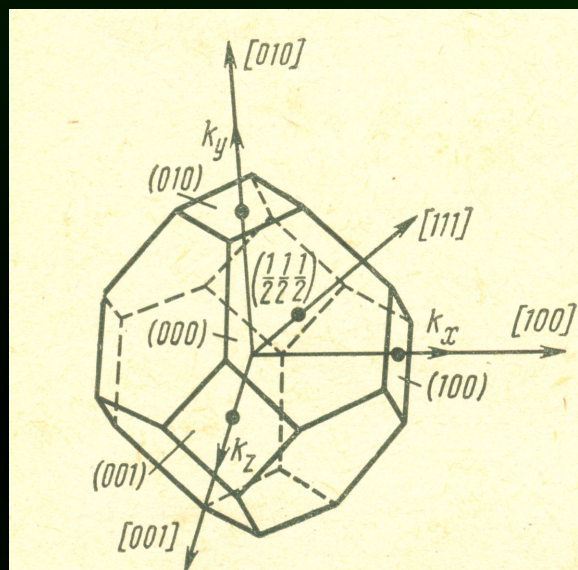
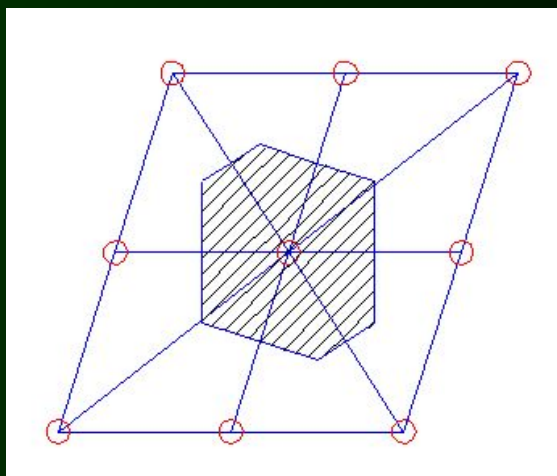
Алмаз



Графит



# Ячейка Вигнера–Зейтца



Алмаз

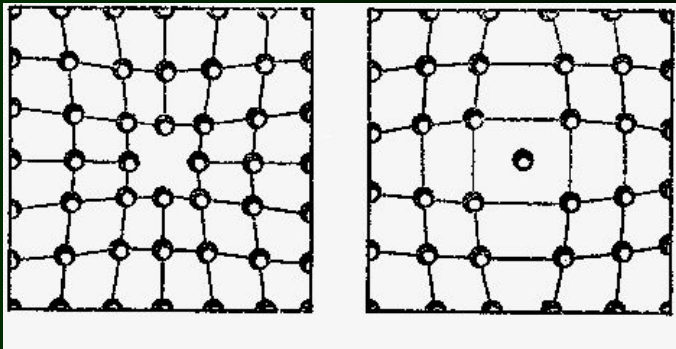
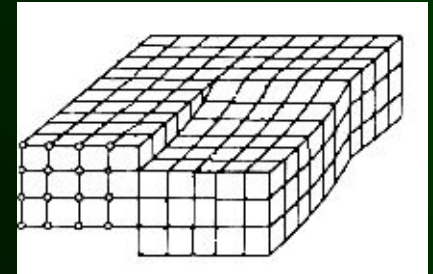
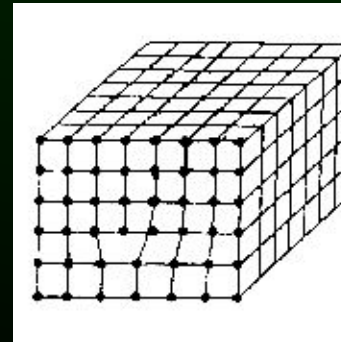
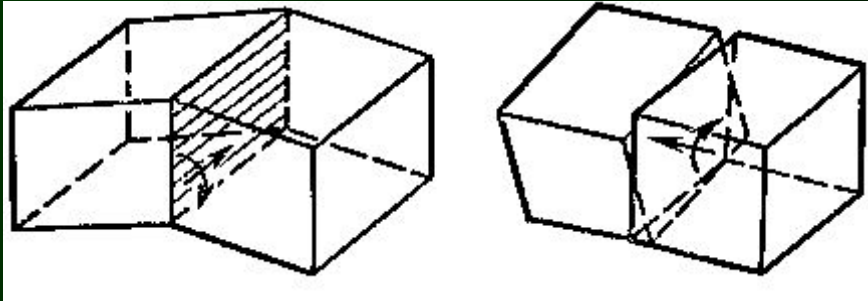
# Анизотропия кристаллов

Материал	<i>Модуль Юнга, <math>10^4</math> Н/мм<sup>2</sup></i>	
	[111]	[100]
Алюминий	7,6	6,3
Золото	11,2	4,2
Медь	19,6	7,0
Свинец	2,8	0,7

Теллур	
[100]	[001]
<i>Удельное сопротивление, <math>10^{-8}</math> Ом·м</i>	
56000	154000
<i>Кэф. теплового расширения, <math>10^{-6}</math></i>	
-1,6	27,2



# Дефекты решетки



При  $E_d = 1$  эВ

$T = 300$  К  
( $kT = 0,03$  эВ)

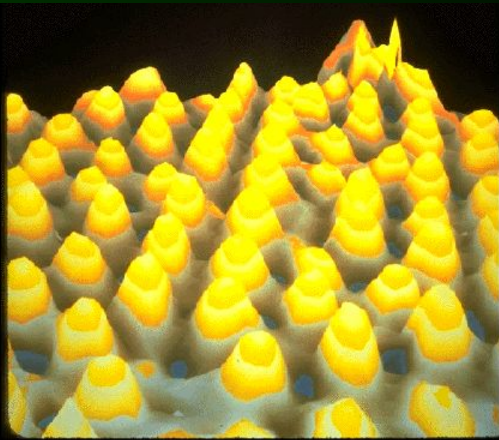
$$N_A / N \approx 10^{-12}\%$$

$T = 600$  К

$$N_A / N \approx 10^{-3}\%$$

$T = 900$  К

$$N_A / N \approx 1\%$$



# Теплоемкость кристаллов

Классическая теория  $C = 3Nk = 3R$  *Закон Дюлонга и Пти*

## Теория Эйнштейна

Энергия осциллятора  $\epsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$

Внутренняя энергия кристалла  $U = 3N \epsilon = \frac{3}{2} N \hbar \omega + \frac{3N \hbar \omega}{\exp(\hbar \omega / kT) - 1}$

Теплоемкость  $C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{3N \hbar \omega}{[\exp(\hbar \omega / kT) - 1]^2} \frac{\hbar \omega}{kT^2} \exp(\hbar \omega / kT)$

# Теория Эйнштейна

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{3N \hbar \omega}{\left[ \exp(\hbar \omega / kT) - 1 \right]^2} \frac{\hbar \omega}{kT^2} \exp(\hbar \omega / kT)$$

При высоких температурах

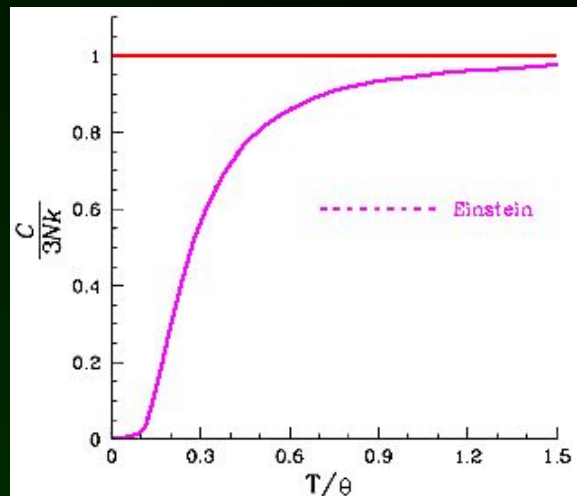
$$(kT \gg \hbar \omega)$$

$$\exp(\hbar \omega / kT) \approx 1 + \hbar \omega / kT \quad C = 3Nk$$

При низких температурах

$$(kT \ll \hbar \omega)$$

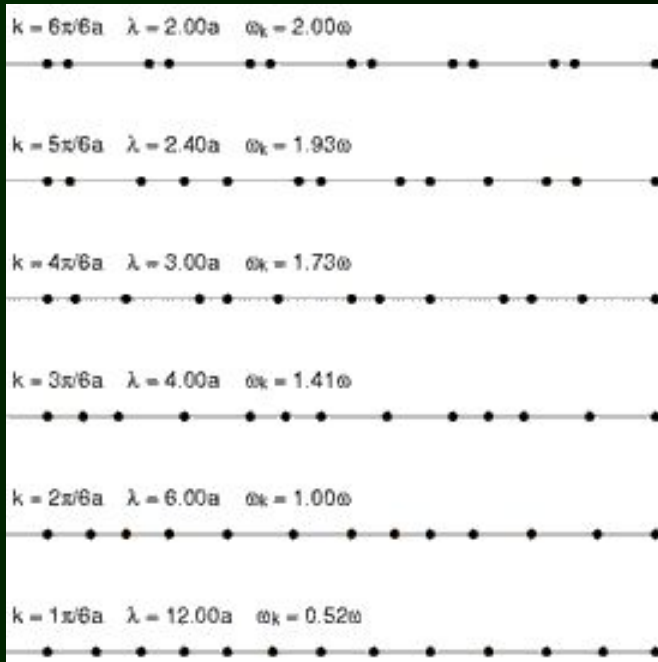
$$C \approx \frac{3N (\hbar \omega)^2}{kT^2} \exp(-\hbar \omega / kT)$$



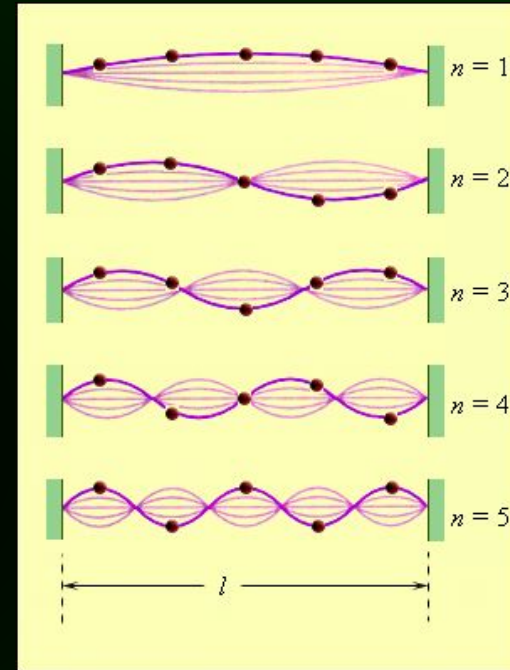
$$\theta = \frac{\hbar \omega}{k}$$

# Теория Дебая

## Упругая волна в кристалле



## Стоячая волна



$$\xi = A \cos(\omega t - kx)$$

$$\xi = 2A \sin(kx) \sin(\omega t)$$

В трехмерном случае

$$\xi = 8A \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) \sin(\omega t)$$

# Теория Дебая

$$k = \frac{n\pi}{l} \Rightarrow \lambda_{\max} = 2l \quad \lambda_{\min} \approx 2a \Rightarrow \omega_{\max} \approx \frac{\pi v}{a}$$

$$E = \int \bar{\varepsilon}(\omega) dN_{\omega}$$

$$E = \frac{9N}{\omega_{\max}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \left( \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar \omega}{\exp(\hbar \omega / kT) - 1} \right) \omega^2 d\omega$$

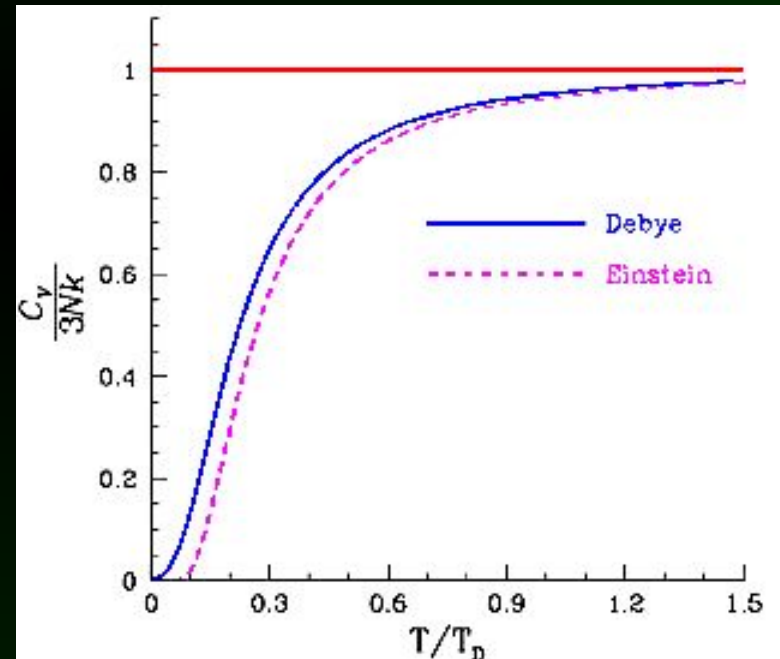
$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{9N \hbar}{\omega_{\max}^3} \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\exp(\hbar \omega / kT) \hbar \omega^4}{(\exp(\hbar \omega / kT) - 1)^2 kT^2} d\omega$$

# Теория Дебая

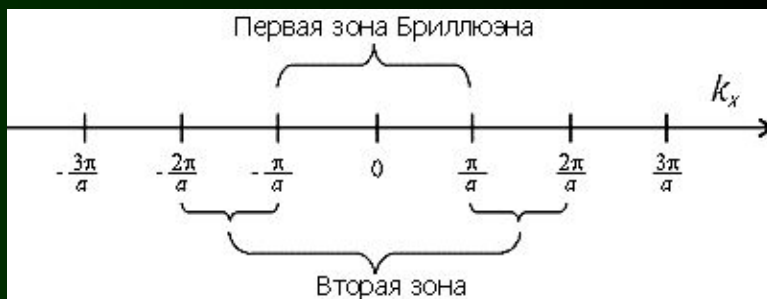
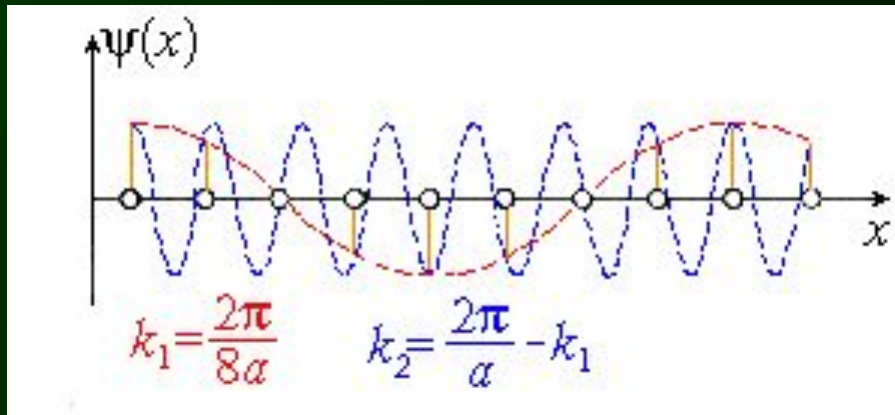
$$x = \frac{\hbar\omega}{kT} \quad \theta = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k} \quad C = 9Nk \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \int_0^{x_{\max}} \frac{e^x x dx}{(e^x - 1)^2}$$

$$T \ll \theta \Rightarrow C \propto T^3$$

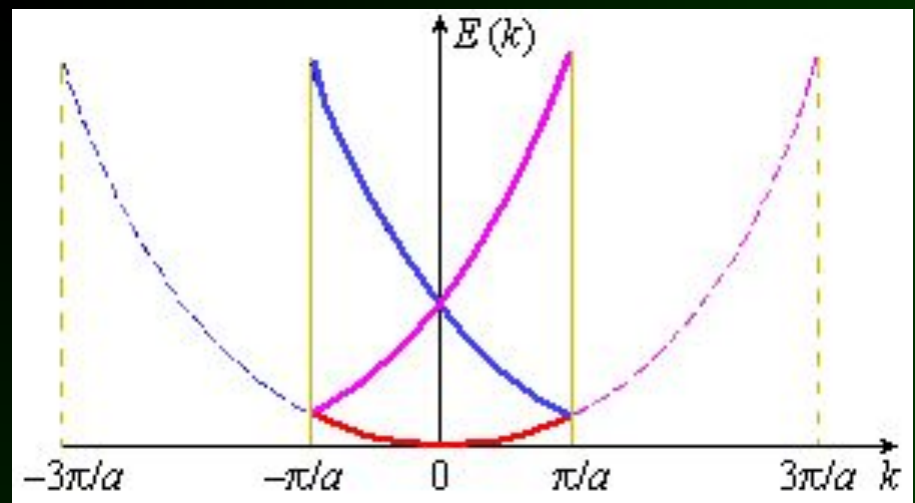
$$T \gg \theta \Rightarrow C = 3Nk$$



# Зоны Бриллюэна



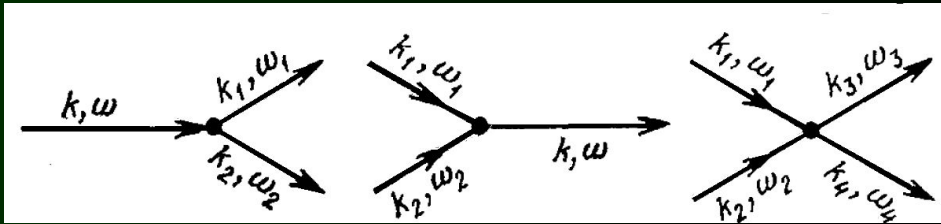
$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$$



# ФОНОНЫ

**Фонон** — квазичастица с энергией  $E = \hbar\omega$

и импульсом  $p = \hbar k$



**Сверхтекучесть**

