ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

7 семестр	8 семестр
лекции – 2часа/неделю,	лекции – 2часа/неделю
практические занятия 2 час/неделю	практические занятия 2 час/неделю
зачет	экзамен

Жабрев Геннадий Игоревич – доцент кафедры № 77

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

1. *Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П.* Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979 .
2. *Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фаддеев М.А*. Кристаллогра-фия. Учебник для вузов. М.: Издательство Физико-математической литературы, 2000.
3. *Новиков И.И., Розин К.М*. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. Учебник для вузов. М.: Металлургия, 1990.
4. *Конвей Дж., Слоэн Н*. Упаковки шаров, решетки и группы: В 2-х т. Пер. с англ. М.: Мир, 1990.
5. Современная кристаллография. т.1-3. М.: Наука, 1979.

***Темы лекции*:**

1.Кристаллические и аморфные твердые тела.

2.Определение кристалла.

3.Элементарная ячейка.

4.Ближний и дальний порядок.

5.Монокристаллы и поликристаллы.

Вещество может находиться в одном из четырех агрегатных состояниях:

- **твердое,**
- **жидкое,**
- **газообразное,**
- **плазменное.**

Отличительные особенности твердого состояния:

- **стабильность формы,**
- **характер тепловых движений атомов - малые колебания около положений равновесия.**

Одним из возможных принципов классификации твердых тел является разделение твердых тел на кристаллические и аморфные.

В физике: кристаллическое твердое тело – это то, у которого микроскопические физические характеристики являются периодической функцией пространственных координат (например, электронная плотность).

Т.к. твердые тела состоят из атомов, то для наличия подобной периодичности необходимо, чтобы и расположение атомов в кристаллическом твердом теле также являлось трехмерной периодической функцией координат. Кроме того, внешняя форма кристалла всегда представляет собой один из 48 правильных многогранников.

Определение кристалла в кристаллографии:

Кристаллическим твердым телом (кристаллом) называется твердое тело, атомы которого образуют некоторую конфигурацию, регулярно повторяющуюся в пространстве, а естественной формой кристалла является правильный симметричный многогранник.

Из этого определения → любой кристалл можно представить в виде периодически повторяющегося минимального элемента объема, в котором содержится повторяющаяся в данном кристалле конфигурация атомов. Такой элемент объема будем называть *элементарной ячейкой* (кристалла).

С помощью элементарных ячеек можно заполнить без пропусков и наложений друг на друга весь объем кристалла.

В кристаллографии периодически повторяющаяся конфигурация называется *мотивом*.

<u>Некоторые замечания относительно данного определения</u>.

1. **В твердом теле атомы, как правило, находятся в ионизованном состоянии, но т.к. состояние атомов в кристаллографии не рассматривается, то будет использоваться термин "атом".**

2. **В твердом теле атомы всегда испытывают тепловые колебания относительно положений равновесия. Данным обстоятельством в кристаллографии пренебрегают и считают атомы неподвижными, а координаты центров тяжести атомов совпадающими с положениями равновесия (в дальнейшем будет использоваться термин "центр атома").**

3. **Любое реальное кристаллическое твердое тело всегда имеет некоторое количество каких-либо нарушений в периодическом повторении атомов, которые называются *дефектами*. В кристаллографии наличием дефектов обычно пренебрегают, т.е. рассматривают *идеальные кристаллы*.**

Вблизи любой точки аморфного твердого тела также можно выделить некоторую характерную конфигурацию атомов, однако периодического повторения в пространстве данной конфигурации нет.

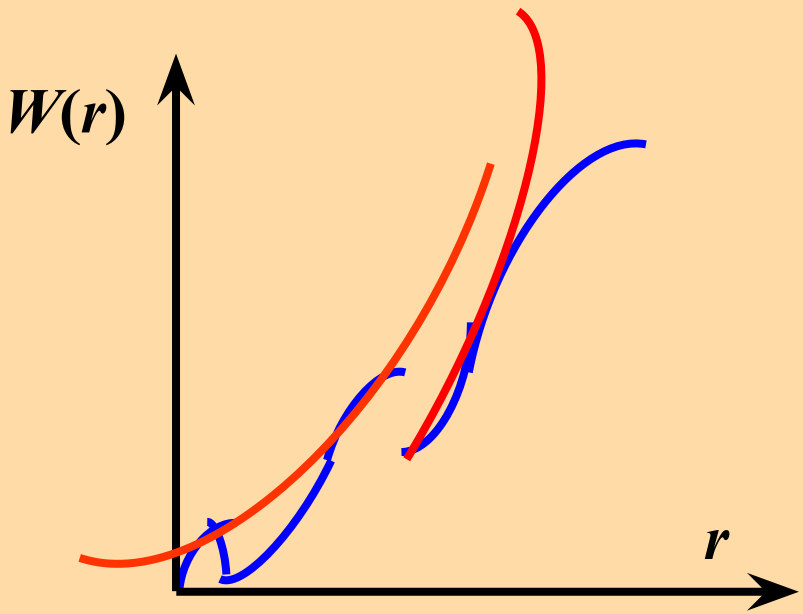
Поэтому аморфное твердое тело характеризуется наличием т.н. *ближнего порядка* (атомов), но отсутствием *дальнего порядка*, присущего кристаллам.

Наличие периодического повторения атомов обеспечивает наличие в кристаллах *дальнего порядка*, т.е., зная расположение атомов в элементарной ячейке и форму элементарной ячейки, можно всегда определить взаимное расположение любых, сколь угодно далеких друг от друга атомов.

Аморфным твердым телам присущ *статистический ближний порядок*, суть которого проще всего понять, введя в рассмотрение *функцию радиального распределения атомов* $W(r)$.

Для моноатомного твердого тела (имеются атомы только одного элемента) $W(r)$ определяет вероятность нахождения другого атома на расстоянии r от выделенного.

Общий вид *W*(*r*) для моноатомного аморфного твердого тела показан на рисунке **сплошной линией**. Максимумы *W*(*r*) соответствуют наиболее часто встречающимся расстояниям и их наличие свидетельствует о существовании статистического ближнего порядка. Если бы его не было, то *W*(*r*) была бы гладкой функцией вида, показанного пунктирной линией.



Аморфные материалы в настоящее время все чаще используются в различных технических приложениях, однако в отличие от кристаллических твердых тел их теоретическое описание еще далеко от завершения. В дальнейшем строение аморфных твердых тел рассматриваться не будет.

Кристаллические твердые тела занимают доминирующее место в окружающем нас материальном мире. Это не только природные горные породы и минералы, но и все металлы, и огромное количество сплавов, которые также являются кристаллическими твердыми телами.

То, что кристалл представляет собой периодическое повторение некоторой конфигурации атомов (элементарной ячейки) впервые было экспериментально доказано в 1912 г. с помощью дифракции рентгеновского излучения.

Впоследствии, с помощью дифракции рентгеновского излучения, электронов и нейтронов были определены конкретные конфигурации атомов для всех элементов таблицы Менделеева (часть из них переходит в кристаллическое состояние при низких температурах) и огромного количества сплавов. До этого кристаллография базировалась только на визуальных исследованиях геометрических свойств больших природных кристаллов.

Результаты таких исследований позволили датскому естествоиспытателю Николаусу Стенону еще в 1669 г. установить закон постоянства углов – во всех кристаллах данного вещества при одинаковых условиях углы между соответствующими гранями одинаковы (площади граней и их форма могут меняться, но взаимный наклон граней остается неизменным).

С этого момента берет начало *кристаллография* – наука о геометрическом строении кристаллических твердых тел, в которой все основные положения выводятся исключительно из соображений симметрии без привлечения каких-либо представлений об атомах, образующих кристалл.

Термин "кристалл" происходит от древнегреческого слова κρυοζ – лёд. В древнем Риме этим же словом называли похожие на лед прозрачные куски кварца (горного хрусталя). В дальнейшем кристаллами стали называть любые природные ограненные камни.

Большие природные кристаллы известны человеку очень давно. Характерными примерами природных кристаллов являются многочисленные разновидности кварца (SiO_2), каменной соли ($NaCl$) и, безусловно, драгоценные камни, такие как рубины (Al_2O_3) и алмазы.

В данном случае, мы имеем дело с *монокристаллами* – твердыми телами, у которых элементарная ячейка непрерывно повторяется во всем объеме образца.

В XIX веке люди научились выращивать искусственные монокристаллы различных веществ. Однако при искусственном выращивании достаточно сложно получить идеальный монокристалл. Как правило, в этом случае получаются *идеально-мозаичные* кристаллы, состоящие из малых монокристаллических *блоков* с линейными размерами порядка 10^{-5} см, повернутые друг относительно друга на малые углы порядка десятка угловых минут.

При искусственном выращивании монокристаллов атомы из окружающей среды отлагаются на его гранях, и грани нарастают параллельно самим себе.

Большинство кристаллических твердых тел являются *поликристаллами*, у которых непрерывное повторение элементарной ячейки имеет место в объемах (блоках) много меньших размера образца, но характерные размеры блоков много больше характерного межатомного расстояния в решетке (~ 1 Å = 10^{-8} см = 0,1 нм).

В общем случае поликристалл можно рассматривать как большое количество монокристаллических блоков, повернутых друг относительно друга на большие углы хаотическим образом. Именно в поликристаллическом состоянии находится подавляющее большинство используемых в нашей жизни, металлов и сплавов.

Кристаллы в таблице Менделеева

(H)		кристаллы				жидкости						газы				1 H	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg				293 K (20 ^{0}C)							13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57* La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89** Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt									
*Ln		58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu		
**An		90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr		

Некоторые соотношения векторной и матричной алгебры.

Координаты вектора **r** – ***коэффициенты разложения вектора по векторам базиса*** $\mathbf{a}_i$ $(i = 1, 2, 3)$, $\mathbf{r} = p\mathbf{a}_1 + q\mathbf{a}_2 + r\mathbf{a}_3$.

Скалярное произведение двух векторов **a** и **b** – ***скалярная величина***, **определяемая в <u>любом базисе</u> выражением**

$$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = |\mathbf{a}||\mathbf{b}|\cos\gamma,$$ где γ - угол между векторами **a** и **b**

Модуль **(*абсолютная величина, длина, норма*)** ***вектора*** **r есть <u>скалярная величина</u>**

$$|\mathbf{r}| = \sqrt{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}}$$

Векторное произведение **[ab]** ***есть вектор***, **модуль которого равен**

$$|[\mathbf{ab}]| = |\mathbf{a}||\mathbf{b}|\sin\gamma$$

Смешанное (*скалярно-векторное*) *произведение*

$$\mathbf{a}\cdot[\mathbf{bc}] \equiv [\mathbf{abc}] = [\mathbf{bca}] = [\mathbf{cab}] = -[\mathbf{bac}] = -[\mathbf{cba}] = -[\mathbf{acb}]$$

$$[\mathbf{abc}]^2 = [\mathbf{ab}]\cdot[[\mathbf{bc}][\mathbf{ca}]] =$$

$$= \mathbf{a}^2\mathbf{b}^2\mathbf{c}^2 - \mathbf{a}^2(\mathbf{b}\cdot\mathbf{c})^2 - \mathbf{b}^2(\mathbf{c}\cdot\mathbf{a})^2 - \mathbf{c}^2(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})^2 + 2(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})(\mathbf{b}\cdot\mathbf{c})(\mathbf{c}\cdot\mathbf{a}) =$$

$$= \begin{vmatrix} \mathbf{a}\cdot\mathbf{a} & \mathbf{a}\cdot\mathbf{b} & \mathbf{a}\cdot\mathbf{c} \\ \mathbf{b}\cdot\mathbf{a} & \mathbf{b}\cdot\mathbf{b} & \mathbf{b}\cdot\mathbf{c} \\ \mathbf{c}\cdot\mathbf{a} & \mathbf{c}\cdot\mathbf{b} & \mathbf{c}\cdot\mathbf{c} \end{vmatrix}$$

определитель Грама

Тождество Лагранжа $[\mathbf{ab}]\cdot[\mathbf{cd}] = (\mathbf{a}\cdot\mathbf{c})(\mathbf{b}\cdot\mathbf{d}) - (\mathbf{b}\cdot\mathbf{c})(\mathbf{a}\cdot\mathbf{d})$

***Двойное векторное произведение*:** $[\mathbf{a}[\mathbf{bc}]] = \mathbf{b}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})$

Решение системы уравнений относительно неизвестного вектора $\mathbf{x}$ $([\mathbf{abc}] \neq 0)$

$$\begin{cases} \mathbf{x}\cdot\mathbf{a} = p \\ \mathbf{x}\cdot\mathbf{b} = q \\ \mathbf{x}\cdot\mathbf{c} = r \end{cases} \qquad \mathbf{x} = \frac{p[\mathbf{b},\mathbf{c}] + q[\mathbf{c},\mathbf{a}] + r[\mathbf{a},\mathbf{b}]}{[\mathbf{abc}]}$$

Элемент матрицы ***A*** **(*a_{ij}*) – выражение, стоящее на пересечении *i*-ой строки и *j*-го столбца.**

Транспонированная матрица **A^{T} – в матрице *A* (a_{ij}) строки заменены столбцами, $A^{\text{T}} = (a_{ji})$.**

В частности, *транспонированная матрица вектора-столбца – матрица вектор-строка*.

Квадратная матрица:

- ***диагональная*** **– все элементы, кроме стоящих на главной диагонали, равны нулю,** $a_{ij} = 0$ **для всех** $i \neq j$**;**
- ***единичная*** I (E) **– все элементы главной диагонали равны единице, а все остальные элементы равны нулю,** $a_{ij} = 0$ **для всех** $i \neq j$ **и** $a_{ij} = 1$ **для всех** $i = j$**;**
- ***вырожденная*** **(сингулярная) – определитель** $|A| = \det A = 0$**, понятие определитель имеет смысл только применительно к квадратной матрице.**

симметричная**, если** $A^{\mathrm{T}} = A$**.**

След **(шпур)** ***квадратной матрицы*** **– сумма ее диагональных элементов**

$$\mathrm{Tr}(A) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii},$$ ***всегда*** $\mathrm{Tr}(A) = \mathrm{Tr}(A^{\mathrm{T}})$**.**

Произведение двух матриц $A \cdot B$ ***имеет смысл только тогда*****, когда количество строк матрицы** A **совпадает с количеством столбцов матрицы** B**.**

В общем случае $A \cdot B \neq B \cdot A$**.**

Если $A \cdot B = B \cdot A$**, то матрицы** A **и** B **–** ***перестановочные*****.**

Обратная матрица **для матрицы A обозначается A^{-1}, она удовлетворяет равенствам**

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I.$$

Понятие обратная матрица имеет смысл только применительно к квадратной матрице.

Если обратная матрица существует, то *всегда* $|A||A^{-1}| = 1$.

Для невырожденных матриц **$(A \cdot B)^{-1} = B^{-1} \cdot A^{-1}$.**

Ортогональная матрица **– матрица, у которой**

$$|A| = \det A \neq 0 \text{ и } A^{\mathrm{T}} = A^{-1}.$$

Матричное уравнение **вида** $A \cdot X = B$ **(или вида** $X \cdot A = B$**), где** X **– неизвестная матрица** ***имеет решение***

$$X = A^{-1} \cdot B \ (X = B \cdot A^{-1})$$

Свойства определителей

$\det A = \det A^{T}$

$\det AB = \det A \det B = \det BA$

$\det A^{-1} = (\det A)^{-1} = 1/ \det A$