Atvirkštinė gardelė. Briliueno zonos

Gardelėje daugumas dydžių kaip ir pati gardelė yra periodiniai, pvz. atomų potencialai ir t.t. Parodysime, kad atvirkštinės gardelės sąvoka atsiranda būtent dėl šio tiesioginės gardelės periodiškumo.

Nagrinėkime vienmatę gardelę ir tegul joje dydis *U*, pvz. potencialas yra periodinis

$$U(x) = U(x + na), \qquad \textbf{(7.1)}$$

kur x – koordinatė, $n = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ sveikas skaičius, a – gardelės konstanta. Akivaizdu, kad periodinį dydį galima skleisti Furje (Fourier) eilute

$$U(x) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} U_l e^{i\frac{2\pi l}{a}x} \qquad \textbf{(7.2)}$$

Skleidimo koeficientus galime gauti tokiu būdu

$$U_n = \frac{1}{a}\int_{x_i}^{x_i+a} U(x) e^{-\frac{2\pi i}{a}nx} dx, \qquad \textbf{(7.3)}$$

ką galima patikrinti tiesiogiai įstačius *U(x)* skleidinį. Čia integravimo rėžis x_i parenkamas taip, kad būtų patogu integruoti, pvz. *0* arba $-\frac{a}{2}$ arba dar kita vertė.

Skleidinys iš tikro tenkina periodiškumo sąlygą

$$U(x + na) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} U_l e^{i\frac{2\pi l}{a}(x+na)} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} U_l e^{i\frac{2\pi l}{a}x} e^{2\pi inl} = U(x) \qquad \textbf{(7.4)}$$

Pažymėkime

$$g = \frac{2\pi}{a} l \qquad \textbf{(7.5)}$$

ir pavadinkime tai atvirkštinės gardelės "vektoriumi". Tada dydis

$$b = \frac{2\pi}{a} \qquad \textbf{(7.6)}$$

bus pagrindinis atvirkštinės gardelės periodas (arba atvirkštinės gardelės konstanta). Pirma Briliueno zona tai Vignerio ir Zeitco narvelis atvirkštinėje gardelėje. Visų Briliueno zonų kraštai gali būti užrašyti taip

$$k = \pm\frac{g}{2} = \pm\frac{\pi}{a} l \qquad \textbf{(7.7)}$$

Pereisime prie aukštesnių dimensijų gardelės. Tegul dydis *U* yra periodinis trimatėje gardelėje su periodiškumu lygiu gardelės periodams

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{n}) \qquad \textbf{(7.8)}$$

čia **n** kaip ir anksčiau gardelės vektorius.

Užrašykime skleidinį Furje eilute taip

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} U_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{gr}} \tag{7.9}$$

nekonkretizuodami kol kas kintamojo **g**. Skleidimo koeficientus galime suskaičiuoti panašiai kaip vienmačiu atveju, bet mes tuo nesidomėsime. Mums svarbiausia bus dydžio U periodiškumas

$$U(\mathbf{r}+\mathbf{n}) = \sum_{\mathbf{g}} U_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}(\mathbf{r}+\mathbf{n})} \tag{7.10}$$

Taigi iš čia gausime tokią sąlygą

$$e^{i\mathbf{gn}} = 1, \tag{7.11}$$

kuri bus tenkinama tik tada, kai

$$\mathbf{gn} = 2\pi m, \tag{7.12}$$

kur m – sveikas skaičius.

Kaip prisimename iš anksčiau vektorių **n** užrašome taip

$$\mathbf{n} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \tag{7.13}$$

tad **g** ir **n** sandaugą galime užrašyti taip

$$\mathbf{gn} = n_1\mathbf{ga}_1 + n_2\mathbf{ga}_2 + n_3\mathbf{ga}_3 \tag{7.14}$$

sulygine šias abi lygybes, galime pastebėti, kad pirmoji bus patenkinta tik tada kai

$$\begin{aligned} \mathbf{ga}_1 &= 2\pi l_1 \\ \mathbf{ga}_2 &= 2\pi l_2\,, \\ \mathbf{ga}_3 &= 2\pi l_3 \end{aligned} \tag{7.15}$$

kur l_1, l_2 ir l_3 – sveiki skaičiai.

Įveskime naujus pagalbinius vektorius $\mathbf{b}_i$ tokius, kad jie tenkintų sandaugą

$$\mathbf{a}_i\mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{i,j}, \tag{7.16}$$

t.y. $\mathbf{b}_j$ statmenas $\mathbf{a}_i$, jei indeksai i ir j nesutampa. Sutampantiems indeksams jų sandauga tiesiog lygi 2π . Galime pastebėti, kad vektorius tenkinančius šią sandaugą galime užrašyti taip

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}\,, \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2} \end{aligned} \tag{7.17}$$

nes dviejų vektorių vektorinė sandauga statmena šiems vektoriams arba lygi nuliui. Mišri vektorių sandauga lygi tūriui gretasienio sudaryto iš šių vektorių arba nuliui, jei bet kurie du vektoriai sutampa (arba yra lygiagretūs). Taigi užrašius mūsų vektorių **g** per vektorius **b** jis tenkins visas reikiamas sąvybes

$$\mathbf{g} = l_1\mathbf{b}_1 + l_2\mathbf{b}_2 + l_3\mathbf{b}_3 = \sum_{i=1}^{3} l_i\mathbf{b}_i \qquad \textbf{(7.18)}$$

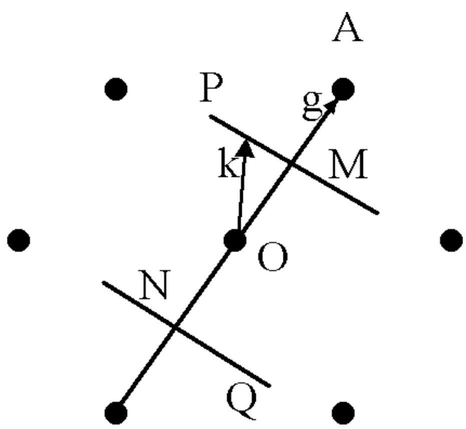
Vektorių $\mathbf{b}_i$ dimensija yra atvirkštinė ilgio dimensija. Todėl gardelė sudaryta vektorių $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ ir $\mathbf{b}_3$ pagrindu vadinama atvirkštine gardele. Matome, kad **g** tenkina tokio pačio tipo sąryšį kaip ir **n** tiesioginėje gardelėje, todėl jis vadinamas atvirkštinės gardelės postūmio arba transliacijos vektoriumi, o $\mathbf{b}_i$ vadinami atvirkštinės gardelė pagrindiniai vektoriais arba periodais.

Gretasienis sudarytas iš vektorių $\mathbf{b}_i$ vadinamas atvirkštinės gardelės elementariu narveliu. Jo tūrį (remdamiesi $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c} = \boldsymbol{b}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c}) - \boldsymbol{c}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})$ lygybe) galima suskaičiuoti taip

$$\begin{aligned} V_{atv} &= \mathbf{b}_1\cdot\mathbf{b}_2\times\mathbf{b}_3 = \mathbf{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3}\right)^3(\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3)\cdot[(\mathbf{a}_3\times\mathbf{a}_1)\times(\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_2)] = \\ &= \left(\frac{2\pi}{\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3}\right)^3(\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3)\cdot\{\mathbf{a}_1[(\mathbf{a}_3\times\mathbf{a}_1)\cdot\mathbf{a}_2] - \mathbf{a}_2[(\mathbf{a}_3\times\mathbf{a}_1)\cdot\mathbf{a}_1]\} \end{aligned} \qquad \textbf{(7.19)}$$

Išmetus nulinį narį ir cikliškai perstatę mišrių sandaugų narius vietomis, atvirkštinės gardelės tūrį galime susieti su tiesioginės tūriu

$$V_{atv} = \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3} = \frac{(2\pi)^3}{V} \qquad \textbf{(7.20)}$$



Elementarų narvelį atvirkštinėje gardelėje galima parinkti ir kitaip. Nagrinėkime atvirkštinės gardelės Vignerio ir Zeico narvelį. Tokio narvelio sienelė – tai plokštuma P išvesta statmenai gardelės vektoriui $\mathbf{g} = OA$, jungiančiam pasirinktą gardelės mazgą O su artimiausiu mazgu A ir einanti per to vektoriaus vidurio tašką M. Užrašysime tos plokštumos (t.y. P) lygtį. Plokštumos taškų koordinates žymėsime vektoriumi $\mathbf{k}$. Plokštumos normalės vienetinis vektorius $\mathbf{n}_0$. Plokštumos lygtis toško O atžvilgiu bus

$$\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}_0 = p, \qquad \textbf{(7.21)}$$

kur $p = OM$ - atstumas nuo koordinačių pradžios taško O iki plokštumos P

$$p = \frac{g}{2} = \frac{|\mathbf{g}|}{2} = \frac{\sqrt{\mathbf{g}^2}}{2} \qquad \textbf{(7.22)}$$

Kadangi **g** statmenas plokštumai P, tai normalė bus

$$\mathbf{n}_0 = \frac{\mathbf{g}}{g} = \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} \tag{7.23}$$

Taigi

$$\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{g}}{|\mathbf{g}|} = \frac{|\mathbf{g}|}{2} \tag{7.24}$$

Arba

$$2\mathbf{k} \cdot \mathbf{g} - \mathbf{g}^2 = 0 \tag{7.25}$$

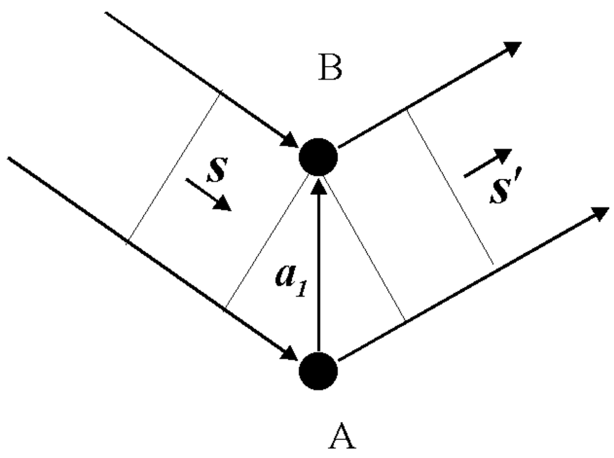
Tai ir yra plokštumos lygtis, kurios paviršiumi slenka vektorius **k**. Parinkus normalės kryptį priešingą, t.y. $\mathbf{n}_0 \to -\mathbf{n}_0$, gausime dar vieną paviršiaus lygtį

$$2\mathbf{k} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{g}^2 = 0 \tag{7.26}$$

Tai bus plokštumos lygiagrečios mūsų pradinei plokštumai P lygtis. Ši naujoji plokštuma pastumta per per vektoriaus **g** ilgį. Taigi abi plokštumos yra to paties narvelio sienelės.

Mažiausias atvirkštinės gardelės narvelis, kurį riboja tokios susikertančios plokštumos vadinamos pirmaja Briliueno zona. Tolimesnių plokštumų erdvė esanti už pirmosios zonos vadinama antraja Briliueno zona ir t.t.

Atvirkštinė gardelė ir Briliueno zonos yra labai glaudžiai susiję su bangų difrakcija kristale. Parodysime tai.



Tegul kristalu sklinga plokščioji banga, kurios ilgis λ, o normalės vektorius $\boldsymbol{s}$ (s=1). Tai gali būti elektromagnetinė banga arba de Broilio (L. de Broglie) banga (pvz. elektronų pluoštelis). Nagrinėkime šios bangos difrakciją Lauės (M. F. T. von Laue) metodu. Paveikslėlyje parodyta gretimų kristalografinių plokštumų atomai A ir B. Atstumas tarp jų lygus gardelės konstantos $\boldsymbol{a}_1$ moduliui. Išsklaidytos bangos normalė $\boldsymbol{s}'$ (s'=1). Tarkime, kad šia kryptimi dėl interferencijos banga stiprinama. Taip bus tada, kai

$$-\boldsymbol{a}_1\boldsymbol{s} + \boldsymbol{a}_1\boldsymbol{s}' = \boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{s}' - \boldsymbol{s}) = l_1\lambda \tag{7.27}$$

l_1 – bet koks sveikas skaičius.

Trimatėje gardelėje interferencinio stiprinimo sąlyga turi būti tenkinama iš karto visoms trims kryptims, taigi

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a}_1(\boldsymbol{s}'-\boldsymbol{s}) &= l_1\lambda \\ \boldsymbol{a}_2(\boldsymbol{s}'-\boldsymbol{s}) &= l_2\lambda \\ \boldsymbol{a}_3(\boldsymbol{s}'-\boldsymbol{s}) &= l_3\lambda \end{aligned} \qquad (7.28)$$

Šios formulės vadinamos Lauės sąlygomis arba Lauės lygtimis.

Šias lygis padauginus iš 2π ir padalinus iš bangos ilgio λ, matyti, kad jos tampa įdentiškos (7.15) formulėms. Iš to išplaukia, kad

$$\boldsymbol{g} = \frac{2\pi}{\lambda}\boldsymbol{s}' - \frac{2\pi}{\lambda}\boldsymbol{s} \qquad (7.29)$$

Apibrėžkime bangos vektorių standartiniu būdu

$$\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\boldsymbol{s} \qquad (7.30)$$

Tuomet formulė (7.29) supaprastėja

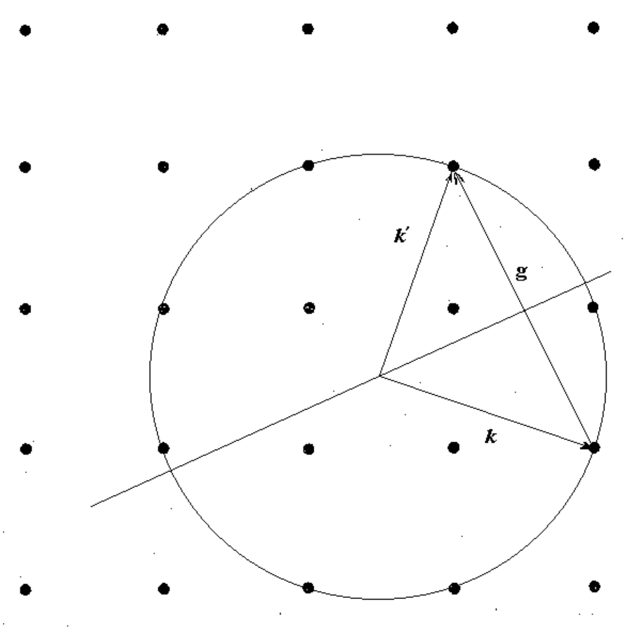
$$\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k} = \boldsymbol{g} \qquad (7.31)$$

Jei bangų vektorių moduliai lygūs $k' = k$, tai iš čia (7.31) $\boldsymbol{k}$ perkėlus į kitą pusę ir pakėlus kvadratu gausime

$$2\boldsymbol{k}\boldsymbol{g} + \boldsymbol{g}^2 = 0 \qquad (7.32)$$

t.y. Briliueno zonos kraštų lytį (7.26).

Įdomų metodą kaip geometriškai interpretuoti (7.31) Lauės sąlygas pasiūlė Evaldas (P. P. Ewald). Pradžioje sukonstruokime atvirkštinę gardelę. Mes tam panaudosime dvimatį pešinį. Jame



pavaizduokime bangos vektorių $\boldsymbol{k}$ taip, kad jo galas sutaptų su kuriuo nors mazgu. Apie $\boldsymbol{k}$ pradžios tašką nubrėžkime apskritimą, kurio spindulys būtų $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$ (erdvėje gautume rutulį, vadinamąją Evaldo sferą). Jei šis apskritimas (sfera) eina per kurį nors atvirkštinės gardelės mazgą, tai duota kryptimi turėsime interferncinį maksimumą. Taip yra, nes atvirkštinės gardelės vektorius $\boldsymbol{g}$ jungia du atvirkštinės gardelės mazgus, vieną, kur baigiasi $\boldsymbol{k}$ ir kitą, kur stebėsime sklaidytos bangos maksimumą. Taigi naudodamiesi Evaldo sfera gausime visas kryptis, kuriomis galimi interferenciniai maksimumai. Taigi formuluojame išvadą: kristalu sklindanti banga atsispindi nuo atominių plokštumų,lygiagrečių Briliueno zonų sienoms, jei bangos vektorius $\boldsymbol{k}$

sutampa su kuriuo nors vektoriumi atvirkštinės gardelės erdvėje, išvestu iš Briliueno zonos centro iki bet kurios Briliueno zonos sienos. Kitais atvejais banga kristalu sklinda netrikdoma.

Iki šiol nagrinėjome kaip Briliueno zonos kraštai užrašomi bangos vektorių $\boldsymbol{k}$ išreiškiant atvirkštinės gardelės vektoriais $\boldsymbol{b}_i$. Mums labiau įprasta matyti sandaugą $\boldsymbol{k}\boldsymbol{a}_i$ ir taikyti Briliueno zonos sąvoką jai. Tuo labiau, kad $\boldsymbol{k}$ dažnai sutinkama kombinacijoje $\boldsymbol{kn}$, pvz. $e^{i\boldsymbol{kn}}$. Tegul $\boldsymbol{k}$ nukreiptas kryptimi lygiagrečia $\boldsymbol{b}_i$. Tada (7.25) ir (7.26) duos

$$-\frac{\boldsymbol{b}_i}{2} < \boldsymbol{k} \le \frac{\boldsymbol{b}_i}{2} \tag{7.33}$$

Dauginkime tai skaliariškai iš $\boldsymbol{a}_I$ ir gausime

$$-\pi < \boldsymbol{k}\boldsymbol{a}_i \le \pi \tag{7.34}$$

Pažiūrėkime dabar prie ko veda Borno ir Karmano sąlygos. Tegul mūsų kristalas turi N_i mazgų išilgai ašies $\mathbf{a}_i$. Viso kristale bus mazgų $N = N_1 N_2 N_3$. Prisiminkime, kad Blocho (F.Bloch) teorema sako jog banginės funkcijos transliacijos pasekoje kinta taip

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{n}) = e^{i\boldsymbol{kn}}\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \tag{7.35}$$

kur $\boldsymbol{k}$ – bangos vektorius, $\boldsymbol{r}$ – koordinatė, $\boldsymbol{n}$ – transliacijos vektorius. Pritaikę cikliškumo sąlygas turėsime

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_1 N_1 + \boldsymbol{a}_2 N_2 + \boldsymbol{a}_3 N_3) = \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \tag{7.36}$$

bet iš kitos pusės

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_1 N_1 + \boldsymbol{a}_2 N_2 + \boldsymbol{a}_3 N_3) = e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{a}_1 N_1 + \boldsymbol{a}_2 N_2 + \boldsymbol{a}_3 N_3)}\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \tag{7.37}$$

Taigi gauname, kad

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_i N_i} = 1 \tag{7.38}$$

arba

$$\mathbf{k}\mathbf{a}_i N_i = 2\pi l_i, \tag{7.39}$$

kur l_i – sveiki skaičiai. Matome, kad gavome sąryšį labai panašų į (7.12), kur vietoje $\mathbf{g}$ stovi $\mathbf{k}$ ir dar yra mazgų skaičiaus daugiklis. Pasiremdami tuo galime rašyti

$$\mathbf{k} = \frac{l_1}{N_1}\mathbf{b}_1 + \frac{l_2}{N_2}\mathbf{b}_2 + \frac{l_3}{N_3}\mathbf{b}_3 = \sum_{i=1}^{3}\frac{l_i}{N_i}\mathbf{b}_i \tag{7.40}$$

Taigi baigtinis mazgų skaičius sudalina Briliueno zoną į dalis ir $\mathbf{k}$ kinta diskretiškai, o ne tolydiškai. Naudodamiesi Briliueno zonos kraštų sąlyga, galime gauti l_i kitimo ribas, kurios bus analogiškos mūsų nagrinėtos vienmatės grandinėlės svyravimų atvejui, t.y.

$$-\frac{N_i}{2} < l_i \le \frac{N_i}{2} \tag{7.41}$$

kai N_i lyginis ir

$$-\frac{N_i - 1}{2} \leq l_i \leq \frac{N_i - 1}{2} \tag{7.42}$$

kai N_i nelyginis skaičius.