Въведение

1. Предмет на ФТТ

В тесен смисъл - физика на кристалите или кондензирано състояние на веществото: течно, кристално и аморфно състояние.

Не разглежда некондензирано състояние на веществото: газообразно и плазмено (движението на частиците не се влияе от взаимодействието между тях).

Кондензирана материя:

Веществата във всички агрегатни състояния без газове и плазма

1. Мека кондензирана материя:

1.1. Течни кристали.

1.2. Течности.

1.3. Полимери.

1.4. Биологични структури.

2. Твърди тела:

2.1. Кристали.

2.2. Аморфни материали: стъкла, сплави, квазикристали, нанотръбички.

2. Аспекти на ФТТ:

Макроскопичен подход (*Кристалофизика*)

Използва феноменологичния подход (макроскопичен или термодинамичен). Основава се на законите на термодинамиката, приложени към кристалите, като се вземе в предвид анизотропията и симетрията, проявяваща се в макроскопичените им свойства, но се абстрахира от микростроежа.

2.2. Микроскопичен подход

2.2.1. Атомно ниво

Кристалографика - Статика на кристалната решетка (КР) – на атомно ниво се разкрива строежа на КР, нейната вътрешна структура.

Динамика на КР – изучава трептенията на КР (на атомите в КР).

2.2.2. Електронно ниво

Физика на електронния строеж и електронните микропроцеси в кристалните твърди тела: Съди се косвено по макросвойствата и явленията им:

„Основната особеност на кристалите е тяхната симетрия”, Шубников (1960г.)

1. Основни понятия на геометричната кристалография

1. Въведение

Особено място във ФТТ заемат кристалите – подреждането на атомите (йони, молекули) им следват определен тримерен закон.

Основен закон на кристалографията: Закон за постоянството на съответните ъгли между стените и ръбовете за даден кристал или различни кристали на едно вещество (Пр.: В кварц – хексагонална 120°).α, β, γ - константи за дадена КР

Равенство на Ойлер – Декарт (за многостен):

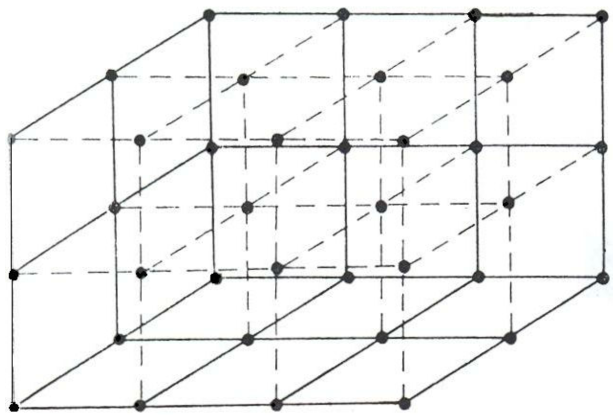
$$p + e = r + 2,$$

където p- брой стени, e – брой върхове и r – брой ръбове.

2. Основни понятия в кристалографията.

Пространствена решетка (ПР):

Безкрайна съвкупност от точки в пространството, наречени възли, чието разположение се подчинява ва определен тримерен периодичен закон – математическа абстракция за изразяване периодичността на КР.



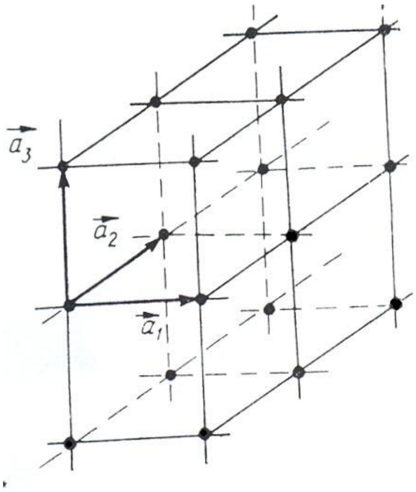
Фиг.1. Част от ортогонална решетка.

Кристалографски оси:

Система от успоредни прави, които можем да прекараме през възлите на ПР в три некомпланарни направления (произволно се избират направленията).

Основни вектори $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$:

Имат начало в даден произволен възел на ПР, определят направленията на кристалографските оси и разстоянията между възлите.



Фиг.2. Основни вектори на пространствена решетка.

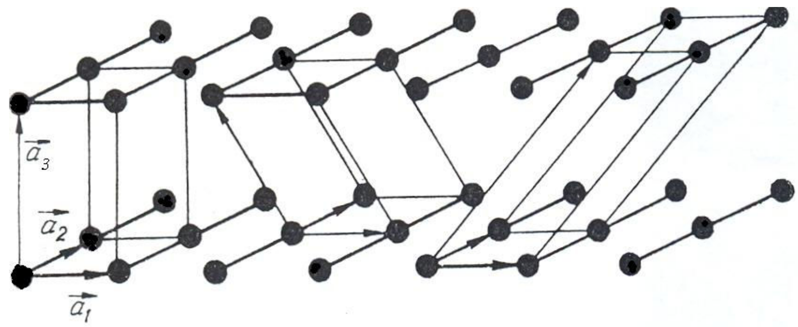
Елементарна клетка (ЕК):

Паралелепипедът, образуван от основните вектори с обем:

$$\Omega_0 = \vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \vec{a}_3.(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \vec{a}_2.(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)$$

Наречен е елементарен обем на ПР.

Основните вектори и елементарната клетка на ПР се избират произволно.



Фиг.3. Различни възможни начини за избор на основни вектори и елементарна клетка при една пространствена решетка.

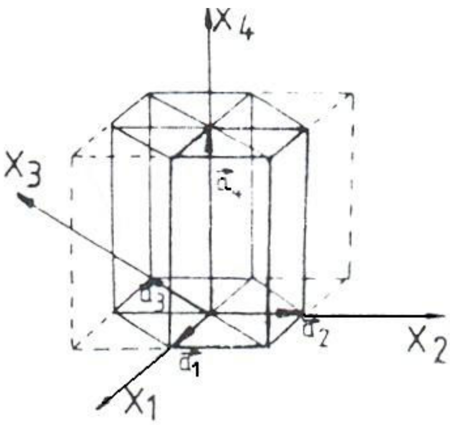
ЕК се нарича **примитивна ЕК** когато има възли само по върховете, минимален обем Ω_0 и съдържа в обема си само един възел.

Съответната пространствена решетка се нарича **проста (P)**.

Видове ПР:

- Проста (P) – с примитивна ЕК: $Z = 1$, $V = V_P$;

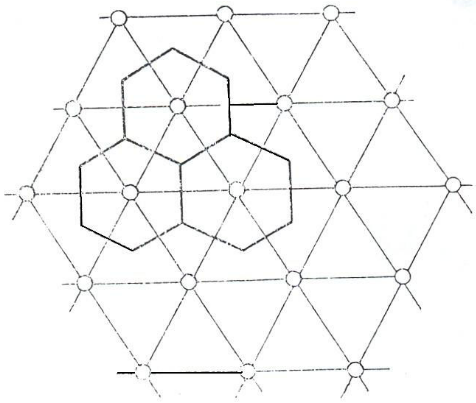
- Сложни (използват се от различни геометрични и физични съображения):
  - базоцентрирана (C) ЕК: $Z = 2$, $V_C = 2V_P$;
  - стенноцентрирана (F) ЕК: $Z = 4$, $V_F = 4V_P$;
  - обемноцентрирана (I) ЕК: $Z = 2$, $V_I = 2V_P$.



Фиг.4. Основни вектори и елементарна клетка на хексагонална решетка.

3. Клетка на Вигнер-Зайц

Всяка най-малка област от пространството, заета от решетката, чрез транслация на която то може да бъде запълнено изцяло. Това е примитивна ЕК, т.к. съдържа 1 възел.



Фиг.5. Елементарна клетка на Вигнер-Зайц при равнинната хексагонална решетка.

Кристална структура се образува, ако всеки възел е свързан с градивни частици.

$\boxed{\textbf{Кристална структура = ПР + Базис} \text{ (градивни частици)}}$

4. Транслационна симетрия

Симетрия – Свойството на един природен обект да съвпада сам със себе си при известни операции (симетрични) извършени над него.

Операции на симетрия – Преобразувания на точките на обекта, при които взаимното им разположение и разстоянията между тях не се изменят.

Транслация (основна операция на симетрия при пространствените решетки) – преместване, вследствие на постъпателно движение, при което една безкрайна съвкупност от точки съвпада сама със себе си. Означава се с оператор $\hat{t}$.

$$\vec{r}' = \hat{t}\vec{r} = \vec{r} + \vec{a}_n$$

Вектор на транслация – описва се чрез основен вектор:

$$\vec{a}_n = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$$

Основните вектори $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ се наричат транслационни периоди

u_1, u_2, u_3 - три произволни цели числа

При крайните тела транслацията води до преместването им в пространството, но то е минимално и може да се пренебрегне.

5. Геометрия на пространствената решетка

5.1. Възли

С радиус - вектор $\vec{R}$ може да се представи всеки възел, ако вече е избран начален (нулев) възел:

$$\vec{R} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$$

$[[u_1\ u_2\ u_3]]$ - координати на възел

Ако трите са цели числа – възлите са във върховете на ЕК.

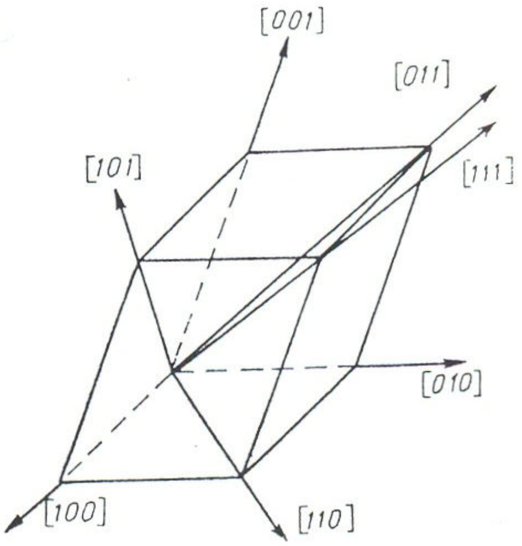
Ако трите са дробни числа – възлите не са във върховете на ЕК.

5.2. Възлови прави

Един възел се избира за нулев. Възловата права е напълно определена от нулевия възел и нейния най-близък възел с координати $[[u_1\ u_2\ u_3]]$.

$[u_1\ u_2\ u_3]$ – индекси на възлова права

$< u_1\ u_2\ u_3>$ - всички направления, които се получават с размяна на знаците и местата на индексите



Фиг. 6. Индекси на някои направления в пространствената решетка.

5.3. Възлови равнини

Параметрично уравнение на произволна равнина в неортогонална координатна система с оси съвпадащи с осите на пространствената решетка, т.е с единични оси $\vec{e}_i = \dfrac{\vec{a}_i}{|\vec{a}_i|}$

$$\frac{x_1}{A_1} + \frac{x_2}{A_2} + \frac{x_3}{A_3} = 1$$

x_1, x_2, x_3 - координати на произволна точка, лежаща в тази равнина

A_1, A_2, A_3 - отрезите на равнините от осите

През възлите на всяка ПР могат да се прекарат безкрайно много успоредни възлови равнини. Ако една равнина е възлова, то уравнението е:

$$\frac{u_1|\vec{a}_1|}{A_1} + \frac{u_2|\vec{a}_2|}{A_2} + \frac{u_3|\vec{a}_3|}{A_3} = 1$$

т.к $x_i = u_i|\vec{a}_i| \to i = 1, 2, 3$, координати на произволна точка от равнината

$\vec{R} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$ или $\vec{R} = x_i\vec{a}_i \;\; i = 1, 2, 3$

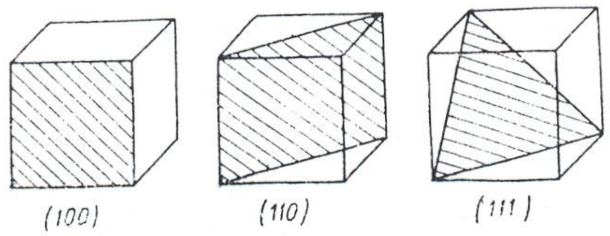
Индекси на Мюлер: Трите взаимно прости числа, които се отнасят като реципрочните стойности на отрезите на равнината от осите на решетката, изразени съответно в единици a_1, a_2 и a_3 (транслационни периоди или основни вектори).

$$h : k : l = h_1 : h_2 : h_3 = \frac{1}{A_1/a_1} : \frac{1}{A_2/a_2} : \frac{1}{A_3/a_3} = \frac{a_1}{A_1} : \frac{a_2}{A_2} : \frac{a_3}{A_3}$$

1. Намираме отрезите на координатните оси в единици на основните вектори: $3a_1, 2a_2, 2a_3$
2. Намираме реципрочните числа: $\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
3. Намираме общия знаменател: 6.
4. Най-малките цели числа, които се отнасят като дробите са числителите им.

Дробите са: $(\frac{2}{6}, \frac{3}{6}, \frac{3}{6})$

Мюлеровите индекси са: (233)



Фиг. 7. Мюлерови индекси на някои важни възлови равнини в кубичната пространствена решетка.

Ако една равнина пресича координатната ос в безкрайност, съответния индекс на Мюлер е 0.

Вижда се, че индексите на Мюлер за всяка възлова равнина, съвпадат с индексите на възлова права перепендикулярна на тази равнина.

За хексагоналната КР мюлерови индекси са : $(h\ k\ i\ l)$, като $i = -(h + k)$ или $h + k + i = 0$