**26. ВЪЛНИ И ТРЕПТЕНИЯ НА ПРОСТРАНСТВЕНИ КРИСТАЛНИ РЕШЕТКИ СПОРЕД ТЕОРИЯТА НА БОРН И КАРМАН. ДИСПЕРСИОННИ КРИВИ НА ОПТИЧНИ И АКУСТИЧНИ ВЪЛНИ В КРИСТАЛИ ОТ МЕД, НАТРИЕВ ЙОДИД И ДИАМАНТ.**

1. Уравнение на движението на частиците в пространствена кристална решетка.

Резултатите за едномерна кристална решетка, съставена от един или два вида частици могат да се обобщят за пространствена кристална решетка (КР) с проста или сложна елементарна клетка (ЕК).

Въвеждаме следните означения:

- $n = 1, 2, 3, \ldots, N$, N – брой ЕК в КР.
- $l = 1, 2, \ldots, s$, s – брой частици (базис) в ЕК.
- $u_n^l$ - преместване спрямо равновесното положение на $l$-тата частица с маса $m_l$ в $n$ - тата ЕК.
- $u_{n\alpha}^l, \alpha = 1, 2, 3$ - проекции на преместването върху трите оси на дадена правоъгълна координатна система.

В случая на пространствената КР уравненията на движение на частиците имат решения от вида на плоски вълни - вълнова функция на движение на частиците:

(1) $$u_{n\alpha}^l = A_\alpha^l . e^{i(\omega . t + \vec{k} . \vec{a}_n)},$$

където векторът на транслация на правата КР е:

(2) $$\vec{a}_n = n_1 . \vec{a}_1 + n_2 . \vec{a}_2 + n_3 . \vec{a}_3$$

Пресмятанията в този случай са значително по сложни от тези за едномерната КР, но не съдържат нищо принципно различно.

2. Зони на Брилуен

Стойностите на вълновия вектор $\vec{k}$ на вълните и трептенията на пространствена КР са ограничени в една област, наречена първа или редуцирана зона на Брилуен.

За да покажем, това заменяме вектор $\vec{k}$ с вектор $\vec{k}'$ в ур. (1):

(3) $$\vec{k}' = \vec{k} + 2\pi . \vec{b}_V,$$

където векторът на транслация на обратната КР е:

(4) $$\vec{b}_V = V_1 . \vec{b}_1 + V_2 . \vec{b}_2 + V_3 . \vec{b}_3 .$$

Получаваме:

(5) $$u_{n\alpha}^l(\vec{k}') = A_\alpha^l . e^{i(\omega . t + \vec{k}' . \vec{a}_n)} = A_\alpha^l . e^{i(\omega . t + \vec{k} . \vec{a}_n)} . e^{i 2\pi . \vec{b}_V . \vec{a}_n}$$

Като имаме в предвид че: $\vec{b}_V . \vec{a}_n = m, \quad m -$ цяло число, получаваме:

(6) $$u_{n\alpha}^l(\vec{k}') = u_{n\alpha}^l(\vec{k})$$

Равенството на вълновите функции ($u(\vec{k}') = u(\vec{k})$) означава, че вълната с вълнов вектор $\vec{k}'$ съвпада с вълната с вълнов вектор $\vec{k}$ или че векторът $\vec{k}'$ е физически еквивалентен на $\vec{k}$. От еквивалентността на двата вълнови вектора, различаващи се с $2\pi b_V$ следва, че всички физични величини, зависещи от вектора $\vec{k}$ са тримерни периодични функции в $k$ - пространството с период $2\pi b_i$ ($b_i -$основни вектори на обратната кристална решетка).

Следователно, достатъчно е да се разглеждат стойностите на $\vec{k}$ в една определена област – ***първа или приведена зона на Брилуен*** с граници:

(7) $$k' = k + 2\pi.b_i \quad (i = 1, 2, 3).$$

Първата зона на Брилуен се определя от границите на ЕК на обратната КР, чиито линейни размери са увеличени 2π пъти. Удобно е първата зона на Брилуен да се избере като клетка на Вигнер-Зайтц на обратната КР, чиито линейни размери са увеличени 2π пъти. Ако умножим двете страни на ур. (7) с $a_i$ получаваме:

(8) $$\vec{k}'.\vec{a}_i = \vec{k}.\vec{a}_i + 2\pi$$

Следователно стойностите на $\vec{k}.\vec{a}_i$ могат да се ограничат в интервал $2\pi$:

(9) $$-\pi \le \vec{k}.\vec{a}_i \le \pi .$$

За едномерния случай получихме:

$$-\pi \le \vec{k}.\vec{a} \le \pi$$

За проста кубична КР първата зона на Брилуен има форма на куб със страна $2\pi / a$.

Следователно, обемът в този случай е: $V_b = (\frac{2\pi}{a})^3 = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}$ , където $\Omega_0$ е обемът на ЕК на правата КР.

Може да се покаже, че и за произволна КР обемът на първата зона на Брилуен е:

$$V_b = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}$$

Чрез транслация $\hat{t}(\vec{k})$ на всички точки от първата зона на Брилуен на $2\pi.\vec{b}_V$ се получават следващите зони на Брилуен:

$$\hat{t}(\vec{k}) = \vec{k} + 2\pi.\vec{b}_V.n ,$$

n=0, I зона на Брилуен
n=1, II зона на Брилуен
n=2, III зона на Брилуен
….
n = n, n-та зона на Брилуен

3. Дисперсионни криви

**Построяване на ЕК на обратната КР -** първа зона на Брилуен**:**

а) свежда се сложната права ЕК до примитивна ( $\vec{a}_i$ ) ;

б) използва се дефиницията за определяне на $\vec{b}_\nu$ .

• Обратната КР на обемноцентрираната кубична КР е стенноцентрираната кубична КР и обратно (СЦ)КР $\rightarrow$ (ОЦ)КР.

• Обратната на кубичната (Р) КР е също (Р) КР.

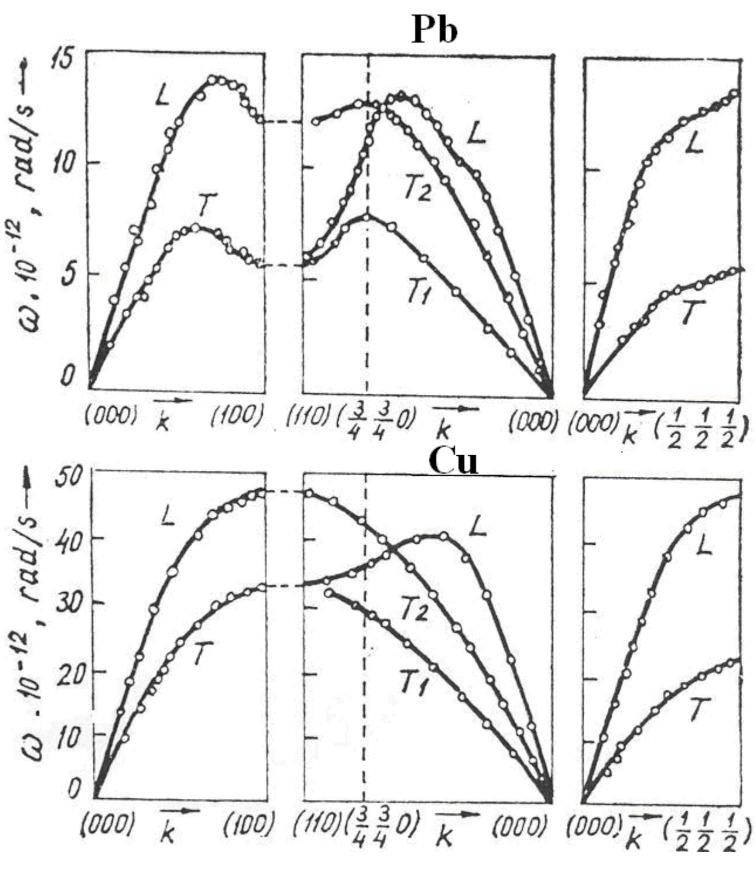
• Обратната на тригоналната (Р) КР е също тригонална (Р) КР.

За кристали с кубична стенноцентрирана КР, първата зона на Брилуен е кубична обемноцентрирана КР.

**1) Пространствената КР има примитивна ЕК с базис s = 1**

- Разпространяват се само акустични вълни.
- Дисперсионните криви в най-общия случай се състоят само от три клона – една квазинадлъжна и две квазинапречни вълни.
- В определени направления тези вълни могат да се превърнат в чисто надлъжни или чисто напречни вълни.
- По осите на симетрия някои от клоновете могат да се сливат.

Разглеждаме дисперсионните криви на акустичните вълни в кристалите на мед и олово. Те имат кубична стенноцентрирана КР, която може да се сведе до Р КР с s = 1.



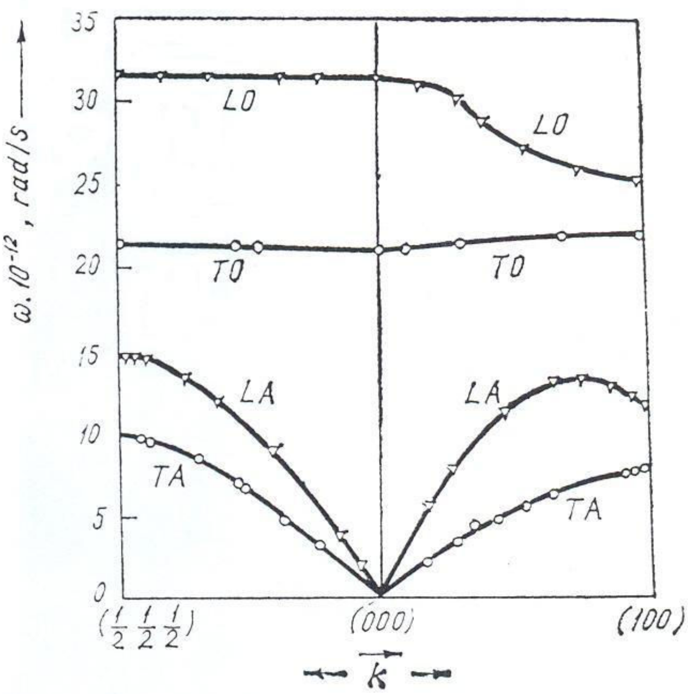

Cu , Pb -с три акустични клона. Различието се дължи на:

Cu – отчита се взаимодействието и с по-отдалечени съседи

Pb – взаимодействието между КР и свободните електрони

2) **Пространствената КР има сложна ЕК с базис s частици, s = 2, 3,.....**
   В общия случай се появяват:
   - 3 акустични вълни
   - (3s -3) оптични вълни

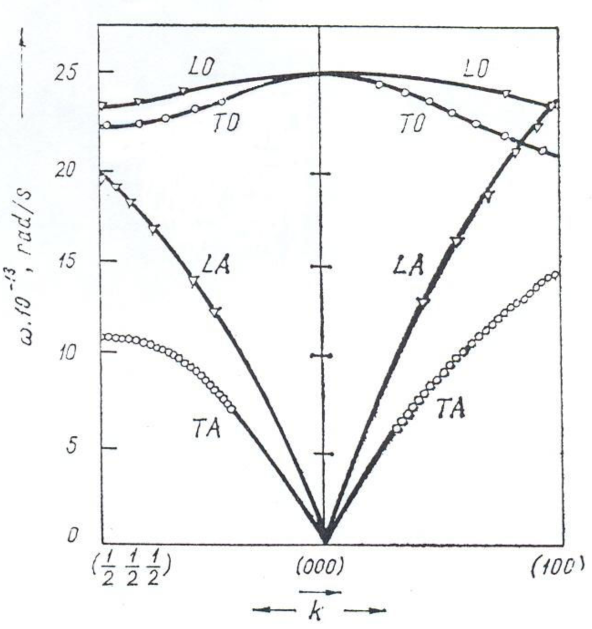
Дисперсионни зависимости в две направления за акустичните и оптичните вълни в кристали на NaJ :




s=2, с различни маси $M_J > M_{Na}$ (2КСЦ КР, отместени на 1/2 по пространствения диагонал).
Има голяма забранена зона за честотите $\omega$, т.к $M_J > M_{Na}$.

---

Дисперсионни зависимости в две направления за акустичните и оптичните вълни в кристали на диаманта:




s = 2, с равни маси $M_C = M_C$ (2КСЦ КР, отместени на 1/4 по пространствения диагонал)
Липсва забранена зона в направление [100], т.к $M_C = M_C$.