§3 Дефекты в кристаллах.

План:

1. *Обратное пространство. Обратная решетка.*
2. *Векторы обратной решетки.*
3. *Условие дифракции.*
4. *Зоны Бриллюэна.*
5. *Дефекты в кристаллах. Классификация дефектов.*
6. *Точечные дефекты кристаллической решетки.*
7. *Дислокации.*

1. Обратное пространство. Обратная решетка

$\vec{a}, \vec{b}$ и $\vec{c}$

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi[\vec{b}\vec{c}]}{(\vec{a}[\vec{b}\vec{c}])}, \quad \vec{b}^* = \frac{2\pi[\vec{c}\vec{a}]}{(\vec{a}[\vec{b}\vec{c}])}, \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi[\vec{a}\vec{b}]}{(\vec{a}[\vec{b}\vec{c}])}$$

$$(\vec{a}^*\vec{b}) = (\vec{a}^*\vec{c}) = (\vec{b}^*\vec{a}) = (\vec{b}^*\vec{c}) = (\vec{c}^*\vec{a}) = (\vec{c}^*\vec{b}) = 0,$$

$$(\vec{a}^* a) = (\vec{b}^* b) = (\vec{c}^* c) = 2\pi.$$

$$\vec{a} = \frac{2\pi[\vec{b}^*\vec{c}^*]}{(\vec{a}^*[\vec{b}^*\vec{c}^*])}$$

2. Векторы обратной решетки

$$\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$$

$$\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

где h, k, l — целые числа

$$\vec{R}\vec{G} = (m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c})(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) =$$
$$= (mh + nk + pl)2\pi = 2\pi N,$$

где N — целое число $(\exp(i\vec{G}\vec{R}) = 1)$

2. Векторы обратной решетки

$\vec{G}$ $\quad h, k, l \quad (hkl) \quad \frac{1}{h}\vec{a} - \frac{1}{k}\vec{b}$

$$\vec{G}\left(\frac{1}{h}\vec{a} - \frac{1}{k}\vec{b}\right) = (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*)\left(\frac{1}{h}\vec{a} - \frac{1}{k}\vec{b}\right) = \vec{a}^* a - \vec{b}^* b = 0.$$

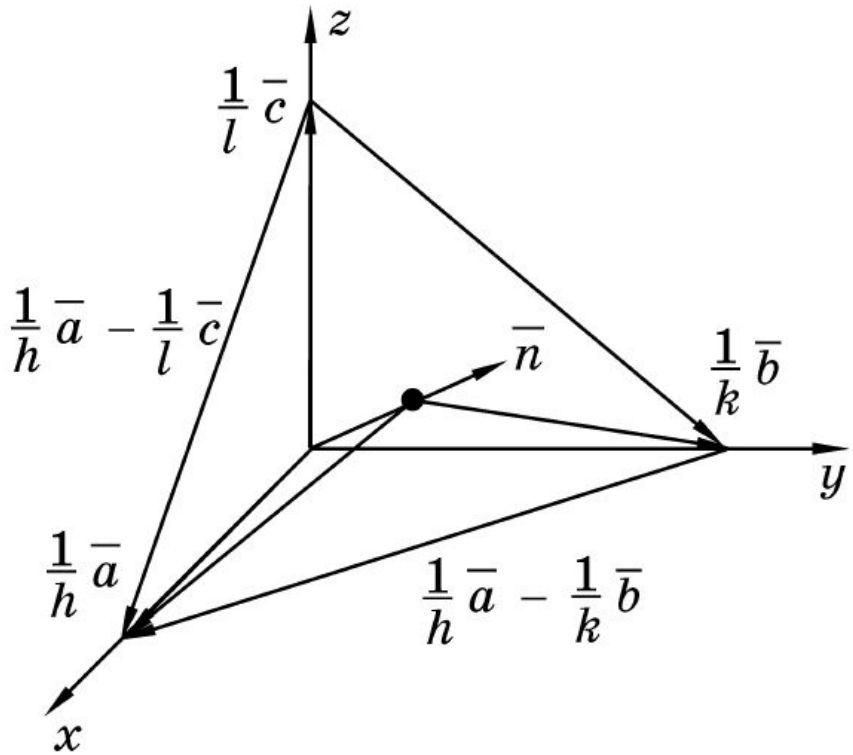
$$\frac{1}{h}\vec{a} - \frac{1}{l}\vec{c}$$

$$|G| = \frac{2\pi}{d_{hkl}} \qquad \vec{n} = \frac{\vec{G}}{|\vec{G}|}$$

$$d_{(hkl)} \qquad \frac{\vec{a}}{h}$$

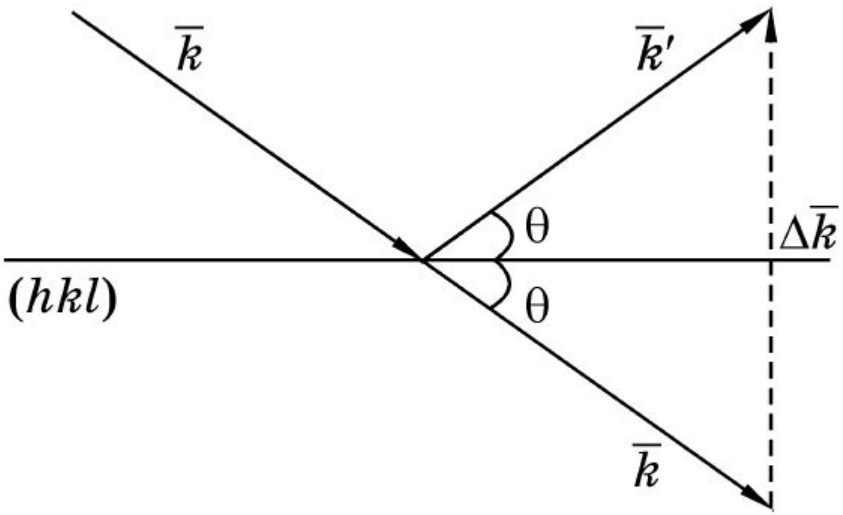
$$d_{hkl} = \frac{1}{h}(\vec{n}\vec{a}) = \frac{(\vec{G}\vec{a})}{|\vec{G}|\,h} = \frac{2\pi}{|G|}$$

$$|G| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$



Расстояние между плоскостями с индексами Миллера (hkl)

3. Условие дифракции



Изменение волнового вектора при зеркальном отражении от плоскости (hkl)

$$|\vec{k}| = |\vec{k}'| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\Delta\vec{k} = (\vec{k}' - \vec{k}) = 2\sin\theta\,|\vec{k}|\,\vec{n} = \left(\frac{4\pi\sin\theta}{\lambda}\right)\vec{n} = \frac{4\pi\sin\theta\vec{G}}{\lambda\,|\vec{G}|} = \left(\frac{2d_{hkl}\sin\theta}{\lambda}\right)\vec{G}$$

$$\Delta\vec{k} = \vec{G} \qquad \vec{k}' = \vec{G} + \bar{k}$$

$$|\vec{k}|^2 = |\vec{k}'^2| \qquad \vec{G}^2 + 2\vec{k}\vec{G} = 0 \qquad \Delta\vec{k} = \vec{G}_{hkl}$$

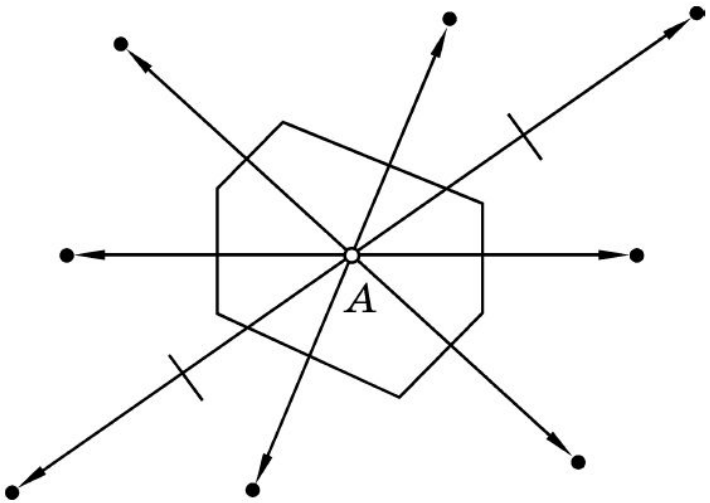
$$\vec{a}\Delta\vec{k} = 2\pi h, \quad \vec{b}\Delta\vec{k} = 2\pi k, \quad \vec{c}\Delta\vec{k} = 2\pi l$$

4. Зоны Бриллюэна.

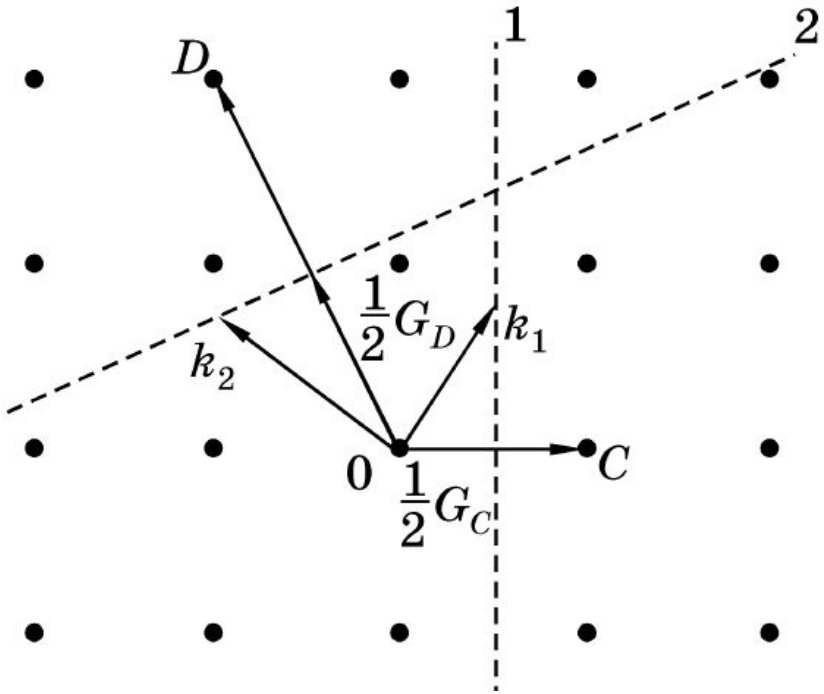
$2\vec{k}\vec{G} + G^2 = 0$ $\quad -\vec{G}$ вместо $\vec{G}$ $\quad 2\vec{k}\vec{G} = G^2$

$$\left(\vec{k}\left(\frac{1}{2}\vec{G}\right)\right) = \left(\frac{1}{2}\vec{G}\right)^2$$

$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ $\quad \vec{k} + \vec{G}$



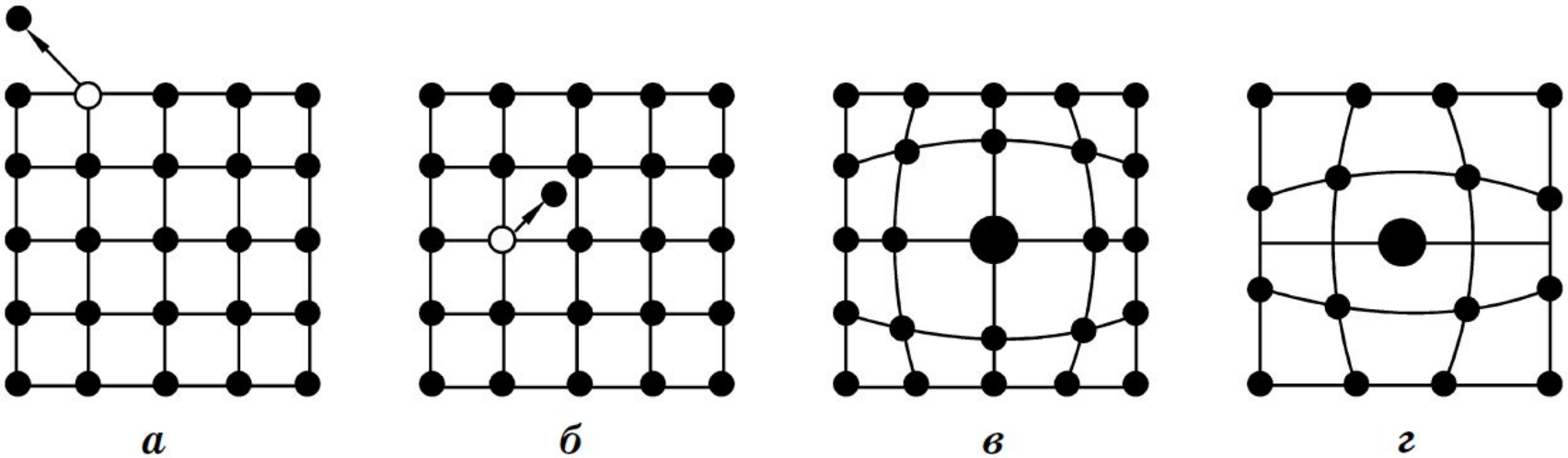
Часть обратного пространства для двумерной косоугольной решетки



Узлы обратной решетки

$$\left(\vec{k}_1\left(\frac{\vec{G}_C}{2}\right) = \left(\frac{\vec{G}_C}{2}\right)^2, \quad \vec{k}_2\left(\frac{\vec{G}_D}{2}\right) = \left(\frac{\vec{G}_D}{2}\right)^2\right)$$

6. Точечные дефекты кристаллической решетки



Дефекты кристаллической решетки:

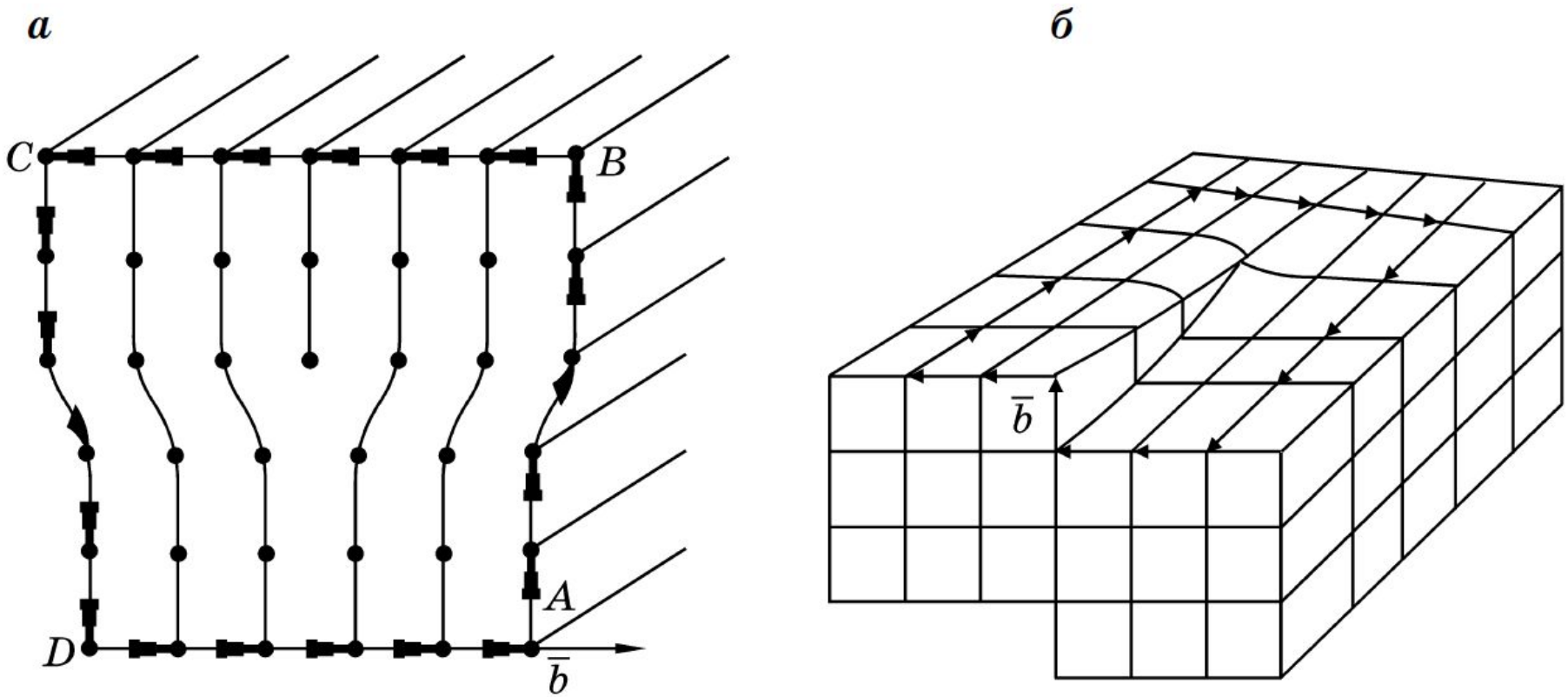
а — по Шоттки; *б* — по Френкелю; *в* — замещения; *г* — внедрения.

$n_ш$ зависит от энергии $E_ш$ n_0

$$n_ш = n_0 \exp\left(-\frac{E_ш}{kT}\right)$$

$$n_ф \approx \sqrt{n_0 n'} \exp\left(-\frac{E_ф}{2k\pi}\right)$$

7. Дислокации



Два вида простых дислокаций:

а — краевая дислокация; *б* — винтовая дислокация.

Спасибо за внимание!